Elektronenauslösung, Reflexion und Umladung von Wasserstoffionen an Ni (110) - Oberflächen

Ulrich von Gemmingen

1981

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547022_0017

Elektronenauslösung, Reflexion und Umladung von Wasserstoffionen an Ni (110) - Oberflächen

DISSERTATION
der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Ulrich von Gemmingen
aus München

München, den 25. November 1980

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1.Gutachter: Prof.Dr.R.Sizmann

2.Gutachter: Univ.Dozent Dr.H.D.Betz

Tag der mündlichen Prüfung:

26 Mai 1981

INHALTSVERZEICHNIS

Zusammenfassung 1

Einleitung 4

Kapitel 1
Meßanordnung,Meßverfahren und -genauigkeit 9

I)Die Meßapparatur 11

A)Die Ionenquelle 11

B)Die Strahlführung 15

1)Die Ionenoptik 15

2)Blendensystem und Strahlaufweitung infolge von Raumladung 17

C)Kristallaufhängung,Goniometer und Präparation des Einkristalls 19

1)Kristallaufhängung 19

2)Goniometer 19

3)Präparation des Einkristalls 20

D)Die Oberfläche 22

1)Augeranalyse 22

2)Kathodenzerstäubung 23

E)Evakuieren 27

1)Bedeckung und Abtragung 28

2)Vakuumbedingungen 30

F)Nachweisvorrichtungen für Ionen,Neutralteilchen und Elektronen 32

1)Trennkondensator 32

2)Ionen-und Neutralteilchenauffänger 32

3)Elektronenauffänger 33

4)Nachweiselektronik und Aufzeichnung 34

5)Strom-und Spannungsversorgungen 34

II)Die Versuchsanordnung und die Meßgenauigkeiten 35

A)Messung der Sekundärelektronenausbeute bei unterschiedlichem Einfallswinkel der Ionen 35

B)Messung der Energieverteilung der Elektronen 35

C)Räumliche und energetische Verteilungen der durch streifende Ionen ausgelösten Sekundärelektronen 39

D) Reflexion des Ionenstrahls 39
E) Umladung des reflektierten Ionenstrahls 41
F) Energieverlust bei der Reflexion 44

Kapitel 2
Elektronenauslösung durch Ionen 45
I) Einfluß der Kristallstruktur auf die Elektronenauslösung durch Wasserstoffionen 46
A) Die Messungen 46
1) Die Ausbeute bei Protoneneinfall 49
2) Die Ausbeute bei Molekülioneneinfall 55
3) Vergleich mir einem Halbleiter 59
4) Einfluß einer Kohlenstoffbedeckung 59
B) Theoretische Vorstellungen zur Auslösung von Sekundärelektronen durch Ionen 63
1) Vorhandene Theorien 63
a) Kinetische Emission 63
b) Potentialemission 64
c) Molekularer Effekt 65
2) Einfluß der Kristallstruktur 65
3) Transparenzmodell 66
II) Energieverteilung der durch Ionen ausgelösten Elektronen 70
A) Die Messungen 71
1) Energieverteilung bei unterschiedlichem Einfallswinkel der Protonen 71
2) ... bei unterschiedlicher Protonenenergie 71
3) Vergleich Metall Halbleiter 73
4) Einfluß einer Kohlenstoffbedeckung 76
B) Interpretation der Energieverteilung der Sekundärelektronen 76
III) Die Richtungsverteilung der emittierten Elektronen und ihre richtungsabhängige Energieverteilung 79
Stoßmodell 82
A) Ableitung der Energieverteilung 82
B) Abschätzung der Intensitäten 91
C) Zusammenfassende Darstellung 97

Kapitel 3
Reflexion des Ionenstrahls und Energieverlust 99
A) Die Messungen 99
1) Räumliche Verteilung 99
2) Überreflexion 101
3) Halbwertsbreite 103
a) Winkelabhängigkeit 103
b) Energieabhängigkeit 103
4) Bedeckungseinfluß 103
B) Interpretation der Messungen 106
1) Klassische Bahn 106
2) Oberflächenpotential 107
3) Die Aufstreuung 109
a) Stöße 109
b) Oberflächenmosaik 109
4) Coulombexplosion 109
5) Störungen der idealen Oberfläche 110
C) Elektronischer Energieverlust der Ionen bei der Reflexion 111
1) Die Messung 111
2) Die Theorie 111
a) Energieverlust durch Stöße mit einzelnen Elektronen 111
b) Energieverlust infolge kollektiver Anregungen 115
c) Gesamtenergieverlust 116
D) Bildkraft durch dynamische Abschirmung 117

Kapitel 4
Umladung von Wasserstoffionen, die unter flachen Winkeln an Ni(110)-Oberflächen reflektiert werden 119
A) Die Messungen 120
1) W^+-Verhältnis 120
2) W^--Verhältnis 122
3) $W(H_2^+)$-Verhältnis 126
4) Einfluß einer Kohlenstoffbedeckung 130
5) Einfluß einer Wasserstoffbedeckung 130
B) Theorien zur Umladung 132
1) Der Ladungszustand 132
2) Die Abschirmung 133

3) Abschirmlängen an der Oberfläche 134
4) Bindungsverhältnisse 135
C) Neutralisation bei kleinen Energien 135
1) Augerneutralisation 135
2) Einelektronenübergang 135
3) Ladungsrückflußtheorie 136
4) Oszillatorischer Ladungsaustausch 138
5) Polarisiertes Licht bei der Neutralisation 138
D) Abschätzung der Neutralisation 139
1) Ratengleichung 139
2) Die Übergangsrate 141
3) Die Oberflächenladungsdichte 142
4) Die Bahn der Ionen an der Oberfläche 144
5) Abschätzung des W^+-Verhältnisses 145
6) Abschätzung von W^+ durch andere Theorien 147
a) Augerneutralisation 147
b) Einelektronenübergänge 147
E) Umladung zu H^--Ionen 152
Vorhandene Theorien und Messungen
1) Das freie H^--Ion 152
2) Das H^--Ion im Festkörper 152
3) Messungen zur Bildung von H^--Ionen 153
F) Interpretation der Messungen 155
1) Positiver Ladungszustand 155
a) Energieabhängigkeit 155
b) Winkelabhängigkeit 157
2) Negativer Ladungszustand 159
a) Korrelation der Elektronen 160
α) Geschwindigkeitskorrelation 160
ß) Spinkorrelation 162
3) $W(H_2^+)$-Verhältnis 165

Anhang 166
Strahlaufweitung infolge von Raumladung

Literaturverzeichnis 171

ZUSAMMENFASSUNG

Die nachstehenden Wechselwirkungen leichter Ionen mit einkristallinen Metalloberflächen konnten erstmals für atomar reine Flächen untersucht werden.

Dabei haben die Messungen zur Elektronenauslösung, Reflexion und Umladung eines schmalen, parallelen H^+, H_2^+ oder H_3^+-Ionenstrahls der Energie 1,7 bis 6,7 keV/Nukleon und der Stromdichte bis 0,5 $\mu A/mm^2$ an reinen Ni(110)-Oberflächen ($\Theta < 0,01$ ML.) unter Vakuumbedingungen im unteren 10^{-10} mbar Bereich folgendes ergeben:

Die Ausbeute der Elektronenauslösung steigt mit flacher werdendem Einfallswinkel ϑ der Ionen zur Oberfläche wie $\sec\vartheta$. Dieser geometrischen Abhängigkeit sind Einsenkungen mit Verringerungen der Ausbeute bis zu 20% überlagert, wenn die Ionen in eine niedrigindizierte Kristallrichtung einfallen. Dies kann durch unterschiedliche Transparenz der Kristalloberfläche für den Ionenstrahl gedeutet werden. Die Ausbeute hängt empfindlich von der kristallinen Struktur der obersten 5 Atomlagen ab.

Die energetischen Verteilungen der Elektronen wurden für Protonen unterschiedlicher Einfallswinkel und -energien, sowie bei reinen und bedeckten Oberflächen und für Ni und Si im Vergleich gemessen. Sie hatten ein niederenergetisches Maximum bei einigen eV der Elektronenenergie und fielen für höhere Energien etwa exponentiell ab. Die höchsten noch auflösbaren Werte lagen bei 7 bis 25 eV für Ionenenergien von 0,5 bis 5 keV, und waren bei bedeckten Ni-oder reinen Si-Oberflächen gegenüber reinem Ni in Richtung kleinerer Energien verschoben.

Bei streifendem Ioneneinfall auf reine Ni(110)-Oberflächen zeigten die räumlichen und energetischen Verteilungen der ausgelösten Elektronen eine bevorzugte Emission in "Vorwärtsrichtung", der Richtung der reflektierten Ionen, mit Energien, die Geschwindigkeiten der Größe der Ionengeschwindigkeiten entsprachen.

Während sich die Auslöseraten und die mittleren Elektronenenergien durch Theorien zur kinetischen Emission beschreiben ließen,konnte die räumliche und energetische Verteilung durch ein Stoßmodell erklärt werden.Es betrachtet den Emissionsprozess als Folge einer Stoßanregung eines schnellen Leitungselektrons durch das Proton an der Oberfläche.

Die für alle Ladungszustände gleiche räumliche Reflexionsverteilung entsprach einer nahezu spiegelnden Reflexion. Im Energiebereich 1,7 bis 6 keV/Nukleon hatten die Verteilungen eine Varianz von ca.1^{o}.Sie wurden erst bei größeren Reflexionswinkeln als einem Grenzwinkel von ca.3^{o} stark diffus.

Der Energieverlust der streifend reflektierten Ionen betrug im Mittel 3%.Das ist im Einklang mit Theorien,in denen Energieverluste betrachtet wurden,die zu etwa 90% von Einzelstößen mit Elektronen und zu 10% aus kollektiven Anregungen stammen. Die gemessene,durch Elektronenauslösung verlorene Energie,betrug 20% des Energieverlustes.

Aus der Reflexion,Elektronenemission und dem Energieverlust läßt sich ableiten,daß die Ionen keine räumlichen Oszillationen an der Oberfläche ausführen,wie sie sich aus Berechnungen unter Berücksichtigung der Bildkraft ergeben.

Die Messungen zur Umladung wurden für streifende Ionen im Energiebereich von 1,7 bis 6,7 keV/Nukleon und bei Reflexionswinkeln von 0,7 bis $3,5^{o}$ an reinen und mit C bedeckten Ni(110)-Oberflächen durchgeführt.Die Anteile der reflektierten Protonen waren je nach Energie und Winkel zwischen 0,02% und 2%,der H^{-}-Ionen zwischen 0,015% und 0,27%.Sie steigen sowohl mit der Energie in nicht oszillatorischer Weise,als auch mit dem Winkel an.

Die Neutralisation wurde als adiabatischer Prozeß angesehen.Die Wahrscheinlichkeit W^{+} für die Emission von Protonen ergibt mit einer Ratengleichung unter Einbeziehung der örtlichen Elektronendichte an der Oberfläche $W^{+}=\exp(-\xi/v_{p}\sin\alpha_{r})$ mit einer Konstanten ξ ,der Protonengeschwindigkeit v_{p} und dem Reflexionswinkel α_{r}.Eine genauere Annäherung an die Meßergebnisse gelang mit der zusätzlichen Annahme,daß die Neutralisation durch Elektronen,die die

gleiche Geschwindigkeit wie das Proton haben,begünstigt wird. Dies führt auch zu einer Erklärung der Winkelabhängigkeit der H^--Bildung duch die Folgerung einer "aktiven Zone" an der Oberfläche für den Einfang des zweiten Elektrons.

Die H^--Bildung ist für flache Reflexionswinkel der Protonen an Ni(110) ca.3,5 mal geringer als an Cu(110).Da die H^- Ionen nur im Singulettzustand stabil sind,müssen die beiden Elektronen entgegengesetzte Spinrichtungen haben. Daher hängt die Bildung der H^--Ionen vom Angebot der Elektronen entgegengesetzter Spinrichtungen an der Oberfläche ab.

Die Wahrscheinlichkeit für die Emission von H_2^+ -Ionen bei Reflexion einfallender 5 keV H_2^+ -Ionen wurde zu ca. $4 \cdot 10^{-4}$ bestimmt.Sie steigt mit dem Reflexionswinkel an. Dies wird über die Verweilzeit der Ionen an der Oberfläche erklärt.

EINLEITUNG

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit Wechselwirkungen von langsamen Wasserstoffionen ($v_p < v_f$) mit Elektronen und Atomen an der Oberfläche einkristalliner Festkörper.Die Größen v_p und v_f sind die Ionengeschwindigkeit und die Fermigeschwindigkeit der Elektronen im Festkörper.

Frühere Messungen zu diesem Themenkreis zeigten,daß die Beschaffenheit der Oberflächen von ausschlaggebender Bedeutung ist.

Erst im letzten Jahrzehnt wurde die Methodik der Physik der Oberflächen so weit entwickelt,daß Messungen bei genauer Kenntnis der Oberflächenstruktur und-zusammensetzung durchgeführt werden konnten.So gestattet die Analyse von Beugungsreflexen niederenergetischer Elektronen (LEED) die Bestimmung der Oberflächenstruktur einkristalliner Festkörper.Die Augerelektronenspektroskopie (AES) erlaubt die Feststellung der chemischen Zusammensetzung an der Oberfläche. Durch Anwendung einer wirksamen Technologie zur Erzeugung und Aufrechterhaltung höchster Vakua (UHV) kann der Bedeckungsgrad der Oberfläche durch Fremdatome nach einer Reinigung durch Kathodenzerstäubung über Zeiträume von mehreren Stunden sehr gering gehalten werden.Damit waren die physikalisch unabdingbaren Voraussetzungen für reproduzierbare Messungen an definierten Oberflächen gegeben,so z.B. die Ermittlung der Elektronenauslösung und des Elektroneneinfangs durch Ionen an Oberflächen mit bekannter Reinheit und Struktur.

Diese Arbeit stellt erstmalig Messungen von Elektronenauslösung und -einfang bei streifender Reflexion von Wasserstoffionen an reinsten Oberflächen kristalliner Festkörper vor.

Es hatte sich gezeigt,daß unterschiedliche Zustandsdichten für Majoritäts- und Minoritätselektronen(Spin in Richtung des magnetischen Bezugsfelds)je nach kristallographischer Oberflächenorientierung ferromagnetischer Substanzen wie Nickel existieren(85).Die Bildung von H^- Ionen hängt vom Angebot an Elektronen entgegengesetzter Spinrichtungen bei der Wechselwirkung eines Protons mit einer solchen Ni-Oberfläche ab.Dies

legte eine Untersuchung nach der Wahrscheinlichkeit für den negativen Ladungszustand nach streifender Reflexion von Protonen an Ni(110) im Vergleich zum nicht ferromagnetischen Cu(110) nahe.

Die Abbremsung schneller Ionen durch Stöße mit Elektronen wurde 1930 von Bethe und 1933 von Bloch (1) berechnet.Lindhard(2) stellte 1953 eine Theorie für den Energieverlust langsamer Teilchen($v < v_f$) unter Berücksichtigung der dielekrischen Eigenschaften von Festkörpern auf.Weitergehende Betrachtungen zum Energieverlust langsamer Teilchen wurden auf der Basis der Lindhardschen Rechnungen von Ferrell und Ritchie(3)angestellt,die auch die Möglichkeit der Plasmonenanregung in Betracht zogen. Die Vorstellungen zur Abbremsung der Ionen im Festkörper führen zu einem Erklärungsmodell der Elektronenauslösung, der "kinetischen Emission".Darin wird angenommen,daß ein Teil des Energieverlustes für die Stoßanregung der Elektronen beiträgt.

Ein weiterer Auslösungsprozess,die Augeremission von Elektronen,wurde von Massey(4),Shekter(5)in den dreissiger Jahren,dann von Lamb(6)1944 und schließlich von Hagstrum(7)1954 entwickelt,in dem die Neutralisation des Ions an der Oberfläche zur Emission eines Festkörperelektrons Anlaß gibt.

Die Umladung von Ionen wurde erstmals als Elektroneneinfang bei Ion-Atom Stößen hoher Energie in erster Bornscher Näherung von Oppenheimer (8)1928,Brinkman und Kramers(9) 1930 berechnet,und unter Hinzunahme der Kernabstoßung von Jackson und Schiff(10)sowie Bates und Dalgarno(11)1952 erweitert.Gute Übersichten befinden sich bei Mott und Massey (12)sowie McDowell und Coleman(13).

Bohr(43) veröffentlichte 1948 als Zusammenfassung seiner Lebensarbeit über das Verhalten schneller Ionen in Materie grundsätzliche Betrachtungen über die Anwendbarkeit klassischer und quantenmechanischer Vorstellungen bei Stoßprozessen atomarer Teilchen sowie Abschätzungen der Ladungszustände atomarer Teilchen beim Durchdringen von Materie über Wirkungsquerschnitte des Elektroneneinfangs und-verlustes.

Methoden zur Beschreibung des adiabatischen Elektronenübergangs wurden von Landau(14) 1932 und Zener(15)1932 als "Curve crossing"Modelle entwickelt.Sie wurden von Bates(16) weiter ausgeführt,und bilden die Grundlage von Berechnungen des Elektroneneinfangs an der Oberfläche durch einige neuere Arbeiten(17,18).

Die Umladung von Protonen in Festkörpern wurde von Trubnikov und Yavlinskij(17),Brandt und Sizmann(19), Kitagawa und Ohtsuki(18) beschrieben;eine Übersicht gibt Cross(20).

Messungen zur Umladung sind nach den ersten qualitativen Versuchen von Rausch v.Traubenberg(21) mit Protonen und α-Teilchen durch Goldfolien 1922 erst in den fünfziger Jahren von Phillips(22)mit wesentlich besseren Vakuumbedingungen wiederaufgenommen worden.Neuere Messungen stammen von Berkner(81)und Matschke(23).

Die Sekundärelektronenauslösung durch Ionen wurde zuerst von Villard 1899,Rutherford,Thomson und Logeman 1905 (24) beobachtet.Sie war in den dreissiger Jahren Gegenstand einiger Untersuchungen,in denen die starke Abhängigkeit vom Bedeckungszustand der Oberfläche erkannt wurde.Die fünfziger Jahre brachten unter dem Eindruck einer verbesserten Vakuumtechnologie eine verstärkte Inangriffnahme dieses Themas. Eine gute Übersicht gibt Carter und Colligon(25).

Die vorliegende Arbeit ist in vier Kapitel unterteilt.

Kap.1 stellt die experimentellen Grundlagen dar,die Konzeption der Meßapparatur und Meßanordnung sowie die Genauigkeit der Messungen.Insbesondere werden der Aufbau der Ionenquelle und -optik,die Strahlstrom-Begrenzung durch Blenden, die Oberflächenpräparation und die Vakuumbedingungen erläutert,sowie eine einfache Methode des Neutralteilchennachweises vorgestellt.

Kap.2 berichtet über Ergebnisse der Elektronenauslösung durch an der Oberfläche gestreute Wasserstoffionen.Die Elektronenauslösung wurde in Abhängigkeit von der Energie und dem Einfallswinkel der Ionen gemessen.Sie wird mit bestehenden Theorien verglichen,und mit einem Transparenzmodell abgeschätzt.Es berücksichtigt die unterschiedliche Auslösung

der Elektronen infolge der von der einkristallinen Struktur abhängigen Transparenz des Festkörpers für die Ionen.

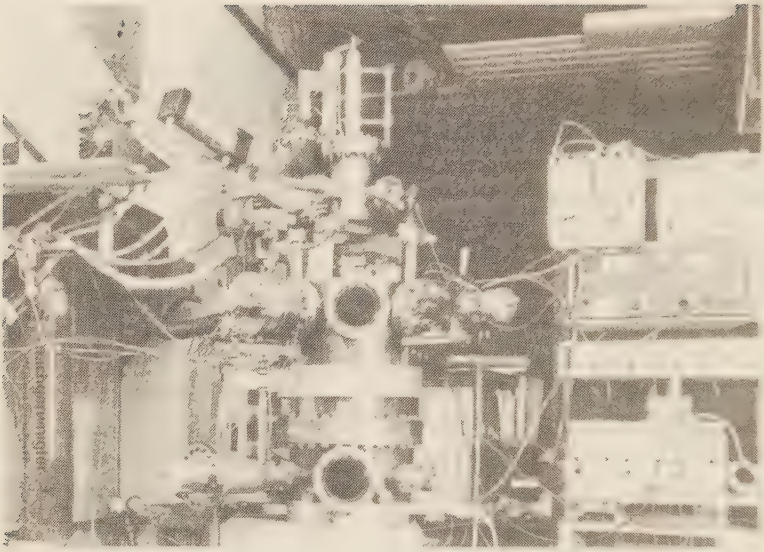
Für streifende Reflexion der Ionen wurde die räumliche und energetische Verteilung der ausgelösten Elektronen ermittelt. Die überraschenderweise bevorzugt in Richtung der reflektierten Ionen stattfindende Emission der Elektronen wird durch ein Stoßmodell abgeschätzt.

Kap.3 untersucht die Reflexion des Ionenstrahls an der Oberfläche.Die Abhängigkeit der Reflexionsverteilung und des Reflexionswinkels vom Einfallswinkel,der Einfallsenergie und der Oberflächenbedeckung wird dargestellt,und mit einfachen Vorstellungen verglichen.

Der Energieverlust der Ionen wurde bei streifender Reflexion gemessen;er läßt sich aus allgemeinen Berechnungen (3) unter der Annahme einer spiegelnden Reflexion der Teilchen erhalten.

Kap.4 stellt die Ergebnisse zur Umladung streifend reflektierter Wasserstoffionen vor.Die Ladungsverhältnisse des reflektierten Strahls wurden in Abhängigkeit von der Teilchengeschwindigkeit bzw.Energie,dem Ausfallswinkel,dem Bedeckungsgrad,und für den negativen Ladungszustand,den magnetischen Eigenschaften der Oberfläche gemessen.Die Ergebnisse ließen sich mit adiabatischen Theorien vergleichen.Aus der Berechnung eines Matrixelementes,das von Kitagawa und Ohtsuki angegeben wurde,ergab sich für die Neutralisation eine Geschwindigkeitskorrelation zwischen Proton und Elektron.Sie führt auf eine gute Übereinstimmung mit den Messungen.

Abschließend ist die Wahrscheinlichkeit für die Emission von H_2^+-Ionen bei streifender Reflexion von H_2^+ -Ionen angegeben,und mit Ergebnissen aus Transmissionsexperimenten verglichen.



a)

Abb.1

a) Gesamtansicht der Meß-apparatur.

b) Kristallaufhängung

c) Elektronenauffänger

c) Kondensator

d) Ionen-u.Neutralteilchen-auffänger.

KAPITEL 1

Meßanordnung,Meßverfahren und Genauigkeit der Messungen.

Der erste Teil des Kapitels erläutert die Versuchsapparatur.Sie wurde mit dem Ziel erstellt,die im folgenden ausgeführten Punkte einer Messung zugänglich zu machen:

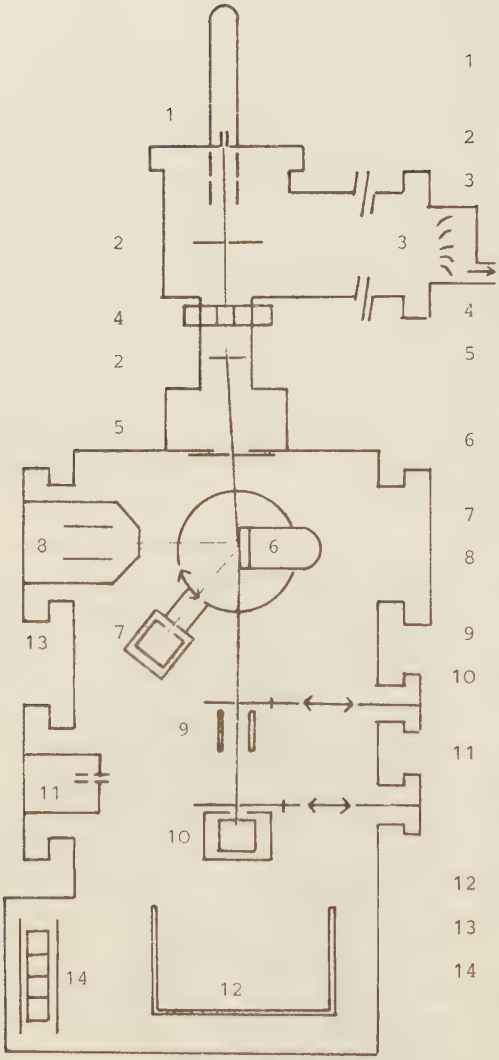
-Erstens die Emission von Elektronen,die durch niederenergetische H^+, H_2^+ oder H_3^+ -Ionen,kurz H-Ionen, unterschiedlicher Einfallsrichtungen von reinen,einkristallinen Ni(110) Oberflächen ausgelöst werden.
-Zweitens die räumlichen und energetischen Verteilungen der emittierten Elektronen.
-Drittens die Reflexionsverteilung und Energieverluste der an der Oberfläche streifend reflektierten Ionen.
-Viertens die Umladung der streifend reflektierten Ionen.

Besondere Sorgfalt wurde auf die Konstruktion der Ionenquelle und des Strahlführungssystems verwandt,um bei möglichst geringem Gasanfall einen parallelen Ionenstrahl größtmöglicher Intensität zur Verfügung zu haben.Das Problem dabei ist,daß die resultierende Strahldichte bei einem gewissen Anspruch an die Parallelität des Strahls infolge der Raumladungserweiterung begrenzt ist.Es wurde durch den Verzicht auf eine nicht nutzbare hohe Stromstärke zugunsten eines klein gehaltenen Gasdurchsatzes gelöst.

Größter Wert wurde auf gute Vakuumbedingungen gelegt.Die Bedeckung der Oberfläche durch Fremdatome konnte während der Messungen so gering gehalten werden,daß sie die Ergebnisse der Messungen unbeeinflußt ließ.Dies erforderte ein Arbeiten im unteren UHV-Bereich ($p<10^{-9}$mbar),und daher erhebliche apparativen Aufwand.

Schließlich wurde auch der Oberflächenpräparation der Einkristalle besonderes Augenmerk geschenkt,da die bei niedrigen Ionenenergien schwierig zu erreichende Reflexion des Strahls stark durch Unebenheiten der Oberfläche vermindert wird.

Die Konstruktion der Ionenquelle und -optik erlaubte hohe Strahldichten ($0,5\,\mu A/mm^2$).So ließen sich bei Verwendung ebener und reiner Oberflächen so große Reflexionsintensitäten erzielen,daß die Ladungszustände in einem eigens kon-



1 Ionenquelle und -optik
2 Blenden
3 Schwingungsdämpfung u.Turbomolekularpumpe
4 Ablenkmagnet
5 Blende u.Druckstufe
6 Kristallhalterung u.Goniometer
7 Elektronenauffänger
8 Augeranalysator
9 Trennkondensator
10 Ionen-und Neutralteilchenauffänger
11 Massenspektrometer und Bayard-Alpert-Röhre
12 Getterschild
13 UHV-Verbindungen
14 Ionengetterpumpe

Abb.2 Schematische Übersicht der Meßapparatur

struierten Ionen-und Neutralteilchenauffänger,kurz Cup, durch direkte Strommessung bestimmt werden konnten.

Die dabei erreichte Empfindlichkeit betrug ca.$1o^{-4}$ des Primärstrahls bei einem Wirkungsgrad von 100% für Ionen und 1%-8% für Neutralteilchen von 1 bis 5 keV.

Der zweite Teil der Kapitels befasst sich mit den einzelnen Meßanordnungen und der Genauigkeit der erzielten Ergebnisse.

I)Die Meßapparatur:

Abb. 2 gibt eine schematische Übersicht der Meßapparatur. Sie ist vertikal aufgestellt.Oben ist der Niederenergie-Beschleuniger (1)-(5) mit Ionenquelle,Strahloptik,Strahlführungssystem und über einen Federbalg schwingungsgedämpfter Turbomolekularpumpe.Er hat eine Ausdehnung von ca.50 cm.

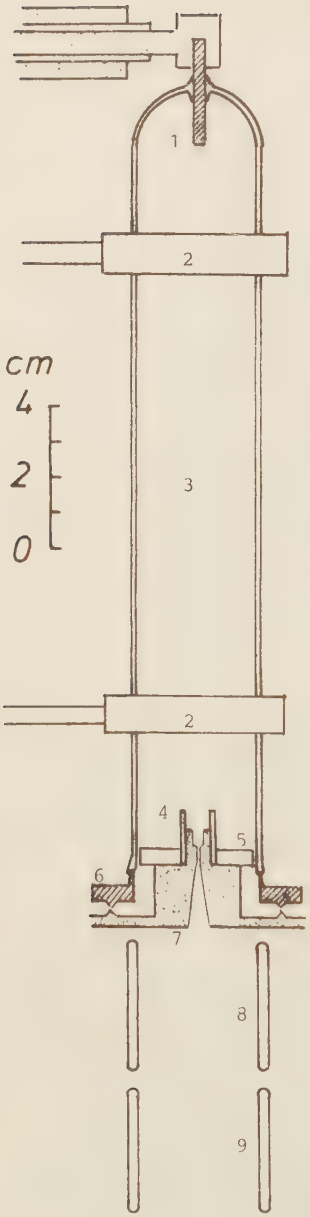
Darunter folgt nach einer Druckstufe der Rezipient,der den Kristall mit Halterung und Goniometer,den Trennkondensator, die Elektronen-und Ionenauffänger,den Augeranalysator,das Massenspektrometer und eine Bayard-Alpert-Druckmeßröhre sowie ein Getterkühlschild und eine Ionengetterpumpe enthält.Alle Vakuumanschlüsse sind metallgedichtet.

Die Leistungsaufnahme der Apparatur liegt bei 0,4 kW im normalen Betrieb,beim Ausheizen steigt sie auf 3,5 kW.

A) Die Ionenquelle:

Die Ausgangsströme des Niederenergiebeschleunigers sind durch die Blendengeometrie und die kleinen Strahlenergien stark begrenzt(siehe Abschnitt IB).Die hohen Anforderungen an das Vakuum der Apparatur gaben daher einer Ionenquelle mit keinem allzuhohem Ausgangsstrom,dafür aber geringen Gasdurchsatz den Vorzug.So wurde statt des strom-und gasintensiven Duoplasmatrons eine Hochfrequenzionenquelle gewählt,die ohne eine Plasmaverdichtung durch ein axiales Magnetfeld arbeitet.Sie ist in Abb.3 schematisch dargestellt.

Eine über einen 200 W Gegentakt-Röhrensender der Frequenz 28 MHz auf die beiden HF-Elektroden (2) induktiv angekoppelte Hochfrequenzwechselspannung der Amplitude 1 kV ionisiert in der Entladungsröhre (3) H_2-Gas bei Drücken von $1o^{-2}$mbar durch Elektronenpendelung im HF-Feld.Die Amplituden der Elektronenbewegung betragen 15 cm,dies legt den Abstand der HF-Elektroden fest.Die im Plasma absorbierte HF-Leistung ist 70 W.



1 Anode mit Wärmeableitung

2 Hochfrequenzelektroden

3 Entladungsrohr aus Glas

4 Plasmabegrenzung aus Saphir

5 Quarzplatte

6 Glas-Metall-Übergang und CF-Dichtschneide

7 Grundplatte mit Ionenkanal

8 verzögernde Elektrode der Ionenoptik

9 beschleunigende Elektrode der Ionenoptik

Abb.3 Ionenquelle und Ionenoptik

Die ringförmigen HF-Elektroden(2) sind räumlich in allen Richtungen justierbar,und bestimmen damit die Symmetrie der Entladung.Sie wurden so eingestellt,daß sich ein maximaler Ionenstrom durch den Ionenkanal ergab.Die Einstellung muß sehr genau≈(0,1mm) erfolgen,da sich die Ströme je nach Justierung um bis zu einer Größenordnung ändern.

Die Energie des austretenden Ionenstrahls E ist bis auf ca.1% gleich eU,wenn U das positive Potential der Anode(1) und damit des Plasmas ist (26).Sie ist immer auf das Potential der geerdeten Apparatur U_O=O bezogen.Der Ionenstrom ist bei gegebener Energie dem Entladungsstrom,der bei U=5kV um 5mA beträgt,proportional.Nahezu das gesamte Plasma hat das Potential der Anode,der Kathodenfall hat die kleine Ausdehnung der Debye-Abschirmlänge l_D,die ca.5mm beträgt.Die Ionen bewegen sich von der Plasmagrenze,die sich über dem Ende des zylindrischen Saphirröhrchens (4) wölbt,auf die Kathode mit dem Ionenkanal zu,und gewinnen in diesem Bereich ihre gesamte kinetische Energie.

Der Kanal ist so konstruiert,daß er der Bahn der Ionen angepaßt ist;er hat am oberen Ende einen Durchmesser von 1,3 mm und am "Cross over" der Ionen eine Verengung von O,5 mm Durchmesser und 5 mm Länge.Dies verringert die Strahlintensität gegenüber einem gleichförmig zylindrischen Kanal von 1,3 mm Durchmesser nur geringfügig,setzt aber den Gasdurchsatz um etwa eine Größenordnung herab.Darüber ist schon von verschiedenen Autoren berichtet worden(27),(28).

Die Gaszufuhr der Ionenquelle erfolgt über eine Bohrung der Grundplatte (7),nachdem das H_2 Gas aus einer Druckflasche durch die Diffusion durch eine Palladium Folie gereinigt wurde.Das Palladium "Leck" ist eine O,1 mm dicke Membran des Durchmessers 18 mm,die aus einer Pd-Ag23 Legierung besteht.Der Zusatz von Silber hat sich als zweckmäßig erwiesen (29).Denn reines Palladium hat einen kritischen Punkt für die Lösung von Wasserstoff bei 300°C,und ist bei Zimmertemperatur durch das Vorliegen zweier Phasen der Wasserstofflösung mechanisch spröde und neigt zum zerreißen.Der kritische Punkt der Silberlegierung liegt bei 20°C.

Der H_2-Durchlaß ist bei bei einem Druckabfall von 1 bar am Leck und einem quellenseitigen Druck von 1 mbar bei 110°C

$2,5 \cdot 10^{-3}$mbar l/s,was zur Speisung der Quelle ausreicht.Er steigt bei 320°C auf $2,5 \cdot 10^{-2}$mbar l/s.
Ein nachfolgendes Dosierventil gestattet die Einregulierung des genauen Quellendrucks auf±5% des Betriebswertes von $2,5 \cdot 10^{-2}$ mbar,der über ein Wärmeleitungsmanometer ständig kontrolliert wird.Die genaue Einhaltung des richtigen Druckes ist ebenso wie die Reinheit des H_2 Gases,die bei Betrieb mit Palladium "Leck" nur Verunreinigungen im ppm Bereich enthält,von ausschlaggebender Bedeutung.Der Ionenstrom verdoppelt sich zwischen 2·und $3 \cdot 10^{-2}$mbar.Er geht bei Verunreinigungen der Ionenquelle stark zurück.

Die Ableitung der entstehenden Wärme durch die Entladung und HF-Anregung von 100 W erfolgt an der Anode über einen Wärmetauscher aus 2 Kupferzylindern,die wegen der Hochspannung durch ein dünnes Al_2O_3 -Rohr elektrisch isoliert, aber wärmeleitend verbunden sind,und an der Kathode über die Grundplatte(7).Das Entladungsrohr(3)das aus Schott-Glas Nr.8243 mit eingeschweißter Vacon 10 Anode und Ring zur Abdichtung an der Grundplatte durch Cu-Dichtungen (ConFlat) besteht,hat im Betrieb eine vergleichsweise niedrige Temperatur von 70-100 °C und daher eine hohe Lebensdauer von ca.500 h.

Der Verzicht auf den bei HF-Ionenquellen üblichen Plasmaverdichtungsmagneten ergab sich aus folgenden Gründen:

-Bei Betrieb mit Magnet zeigte sich,daß der Ionenstrom etwa dreimal größer war,als ohne Magnet.Aber die Divergenz war nach dem Durchgang durch den Kanal ca.viermal vergrößert;eine Folge der Kompression des Plasmas durch den Magneten im Absaugbereich des Kanals.Dadurch wurde die Stromdichte insgesamt leicht verringert.
Da die Strahlintensität nach dem Strahlführungssystem am Ort des Kristalls durch die Strahldichte der Ionenquelle bestimmt wird,wirkte sich insofern der Betrieb mit Magnet leicht nachteilig aus.

-Der Betrieb mit Magnet vergrößert die thermische Belastung der Ionenquelle durch Verdreifachung des Entladungsstroms. Die Lebensdauer der Quelle sinkt auf ca.10% gegenüber einem Betrieb ohne Magnet.

-Es besteht die Gefahr,das Entladungsrohr augenblicklich durchzuschmelzen,wenn der Elektronenstrom der Entladung bei bestimmten Feldstärken des Magneten auf einen Punkt des Entladungsrohres in der Nähe der Anode fokussiert wird.

-Der Betrieb mit Magnet erzeugt durch die höhere Belastung Überschläge,die eine größere Instabilität des Strahlstromes zur Folge haben.

-Der Betrieb mit Magnet unterdrückt die Bildung von Molekülionen H_2^+ und H_3^+.

Bei dieser Konzeption der Ionenquelle wurden bei hoher Lebensdauer,einfacher Handhabung und guter Strahlstabilität Ionenströme von 30 μA,die um die Strahlachse mit einer Divergenz (Varianz) von 3^o gaußverteilt waren,erreicht.Die Stromdichte betrug im Kanal 50 $\mu A/mm^2$,ca.35% des bei der vorhandenen Absauggeometrie erreichbaren Maximalstromdichte von 140 $\mu A/mm^2$ für H_2^+(30).Die Strahlzusammensetzung war 20% H^+, 60% H_2^+ und 20% H_3^+,der Gasdurchsatz 10^{-4}mbar l/s.

B) Die Strahlführung:

1)Die Ionenoptik

Um den aus der Ionenquelle divergent austretenden Strahl in einen parallelen Strahl möglichst kleinen Durchmessers umzuformen,wurde das für Fokussierungszwecke übliche Einzellinsensystem abgeändert.Es bestand ursprünglich aus drei koaxialen Zylinderlinsen gleichen Durchmessers (31).Die mittlere Linse hat das verzögernde Potential. Die erste Linse auf Erdpotential wurde weggelassen,und der Ionenstrahl kommt aus der kleinen Öffnung der ebenen und zur Strahlachse senkrechten Grundplatte (7) in Abb.3 direkt in das verzögernde Feld der mittleren Zylinderlinse (8).Dadurch ist der Strahl nicht mehr dem strahlverbreiterndem Anteil des elektrischen Felds zwischen der ersten und zweiten Linse ausgesetzt.Während der Parallelstrahldurchmesser der üblichen Einzellinsen 4 mm betrug, wurde mit der abgeänderten Konstruktion 1,7mm erreicht; die Stromdichte war 13 $\mu A/mm^2$.

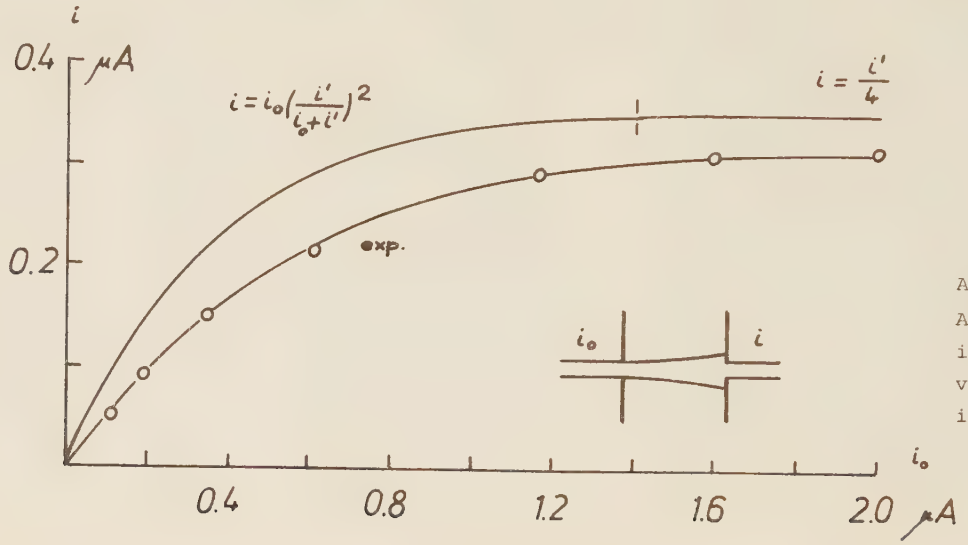


Abb. 4
Ausgangsstrom i
in Abhängigkeit
vom Eingangstrom i_o
in das Blendensystem.

2)Blendensystem und Strahlaufweitung infolge Raumladung

Der Parallelstrahl passiert eine Schlitzblende der Breite 0,4 mm,anschließend das Feld des Trennmagneten und zwei weitere Blenden 1,5 X 0,4 mm^2.Die Ablenkrichtung für die Strahlführung beträgt $2,5^o$,dies wird bei 5 keV H_2^+-Ionen durch ein Feld von 1 kGauss cm erreicht.Die Ablenkung ist allgemein $\sim(M \cdot E)^{-1/2}$,daher nimmt die Auflösung bei höheren Massen ab,sie erlaubteaber eine Trennung der Wasserstoffionen H^+ - H_3^+.Die Energien der Molekülionen wurden durch Ablenkung im Feld der Trennkondensators (Abb. 2 ,9) bestimmt,und erwiesen sich als bis auf 2% gleich.
Die zweite der nachfolgenden Blenden ist zusätzlich eine Druckstufe mit einem Durchlaß von 10^{-2} l/s.Sie reduziert den im Rezipienten anfallenden Gasstrom auf $3 \cdot 10^{-13}$/s. Das ist einem "Teilchenstrom" von 5 nA äquivalent,und läßt ein Arbeiten im unteren 10^{-10}mbar Bereich zu.

Die Öffnung der Blenden (0,4 x 1,5 mm^2) wurde durch den noch vertretbaren Gasdurchlaß begrenzt,der Abstand durch die Forderung an die Parallelität des Strahls($0,1^o$) auf 23 cm festgelegt.Diese Blendengeometrie hat wegen der Strahlaufweitung des parallelen Strahl durch Raumladung eine Verringerung der Strahldichte zur Folge,die den maximalen Durchlaßstrom i ergibt,der oberhalb einer einfallenden Stromdichte i_o konstant bleibt.Die Strahlaufweitung ist für einen homogenen Strahl im Anhang berechnet.Die Homogenität ist gewährleistet, wenn der mittlere Abstand der Ionen kleiner als der Strahldurchmesser ist.Für Strahldurchmesser von 1mm folgt eine Mindeststromdichte für 5 keV Protonen von 0,15 nA/mm^2.Sie ist drei Größenordnungen kleiner als die experimentellen Stromdichten.Die Beziehung zwischen dem auf die erste Blende einfallenden Strom i_o und dem die zweite Blende gleicher Fläche F im Abstand l verlassenden Strom i ist bei einer Energie E und Masse M der Ionen nach(A.20):

$$i = \begin{cases} i_o \cdot (i'/(i_o+i'))^2 & \text{für } i_o < i' \\ i'/4 & \text{für } i_o \geq i' \end{cases} \qquad (1.1)$$

mit

$$i' = 6{,}50\, \varepsilon_o E^{3/2} F / el^2 M^{1/2} = \text{konst.}$$

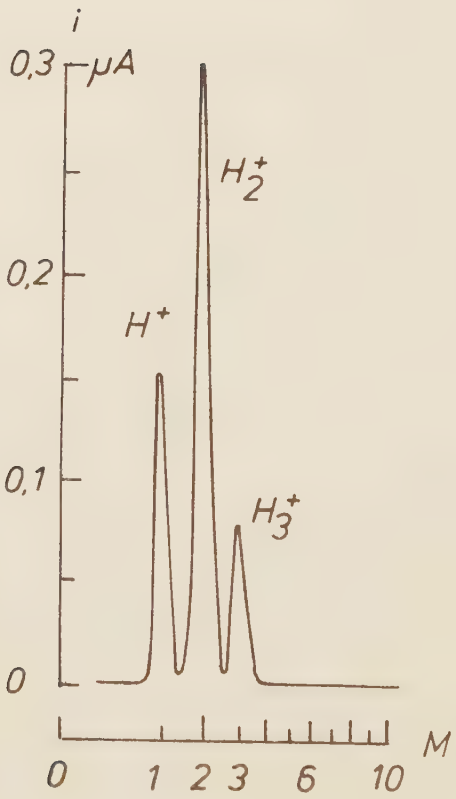


Abb.5 Massenspektrum des Ionenstrahls nach dem Strahlführungssystem.

und ε_o als Vakuumdielektrizitätskonstante
e als Elementarladung.
Der Maximalstrom i_{max} ist mit M_p=Protonenmasse in gebräuchlichen Einheiten:

$$i_{max}=i'/4= 44\ \mu A\cdot(E/kV)^{3/2}\cdot(F/mm^2)/(l/cm)^2\cdot\sqrt{(M/M_p)} \qquad (1.2)$$

Dies ergibt für 5 keV H_2^+ -Ionen mit F=0,6 mm^2 und l=23 cm einen Maximalstrom von 0,35 μA ,der bei einem Eingangsstrom ins Blendensystem von 1,4 μA erreicht wird.

Der Stromverlauf des Ausgangsstroms ist für verschiedene Eingangsströme gemessen worden und in Abb.4 mit dem Ergebnis (1.1) verglichen.Das Spektrum der Molekülionen nach der Trennung im Magnetfeld und den Blenden zeigt Abb.5 in relativem Maßstab (1 $\hat{=}$ 0,3 μA).

C)Kristallaufhängung,Goniometer und Präparation des Einkristalls:

1)Kristallaufhängung:(s.Abb.1 b)
Der Ni(110)-Einkristall wurde als flache rechteckige Scheibe der Abmessungen 8mm und 15 mm,und der Dicke 1.5 mm mit der langen Seite in $[2\bar{1}1]$-Richtung,der kurzen Seite in $[\bar{1}11]$-Richtung präpariert.Er wurde in den Spalt eines magnetischen Kreises in der Richtung der leichten Magnetisierung $[11\bar{1}]$, der aus einem Eisenjoch mit Al-Spule gefertigt war,frei von mechanischen Spannungen eingefügt.Dadurch ließ sich die Magnetisierung der Probe einstellen,und insbesondere sehr genau auf Null abgleichen,was empfindlich durch die Intensität niederenergetischer Augerelektronen im Spektrum des Augeranalysators(Abschnitt D)überprüft werden konnte.
Für Vergleichsmessungen waren am Eisenioch noch zwei weitere Einkristall-Scheibchen,Ni(210) und Cu(110) angebracht.

2)Goniometer:
Das Eisenjoch war beweglich und elektrisch isoliert an einem UHV-kompatiblen Goniometer der Firma Varian,(high precision manipulator Nr.981)befestigt,welches die

Drehung um zwei Achsen und Translation in den drei Raumrichtungen erlaubte; der Drehpunkt der zwei Achsen war der Mittelpunkt der Ni (110)-Oberfläche. (s.Abb.1b).

Der Drehwinkel einer Achse bestimmte die Einstellung des Reflexionswinkels mit einer Genauigkeit von $0,1^{o}$;er konnte motorisch mit einer Winkelgeschwindigkeit von $0,1^{o}/s$ oder $1^{o}/s$ kontinuierlich gedreht werden.

Der Drehwinkel der zweiten Achse legte die Reflexionsebene des Ionenstrahls mit einer Genauigkeit von $0,5^{o}$ fest.

Die Unsicherheit der Einstellung in den drei Translationsrichtungen betrug 0,01 mm.

Die elektrisch isolierte Aufhängung erlaubte Spannungsdifferenzen von bis 10 kV gegenüber dem Rezipienten,und eine Messung der auf den Kristall treffenden bzw.emittierten Ströme .Die Aufhängung ließ sich über einen Strom durch die Magnetspule bis auf Temperaturen von 500-600 K erwärmen.

3)Präparation des Einkristalls:

Die Oberfläche der einkristallinen Proben wurde so präpariert,daß sie optisch spiegelnd und eben waren,und die Orientierung um höchstens $0,2^{o}$ von der vorgegebenen Richtung abwich.Abb.6 zeigt eine Aufnahmen von Laueреflexen der Ni(110) Probe nach mechanischer Präparation und 3-stündiger Temperung bei $1200^{o}C$,die mit einem Pyrometer überprüft wurde. Die Reflexe sind,obwohl sie mit einer kontrastschwachen Polaroidkamera aufgenommen wurden,sehr deutlich und vollständig, was auf einen guten einkristallinen Zustand der Probe hindeutet.

In Ermangelung einer LEED-Apparatur zur Untersuchung der Güte der kristallinen Struktur der Oberfläche konnte die Information aus der ioneninduzierten Sekundärelektronenemission,die auf den kristallinen Zustand der obersten Atomlagen empfindlich ist(Kapitel 2) herangezogen werden. Sie zeigt charakteristische Verminderungen bei Ioneninzidenz in niedrigindizierten Gitterrichtungen,die bei starker Bedeckung oder gestörter Oberflächenstruktur nicht auftreten.

Der in Bereichen von ca.10nm atomar ebene Verlauf der Oberfläche zeigt sich in der Intensität und Schärfe des unter kleinen Winkeln reflektierten Ionenstrahls.Eine spiegelnde

Abb.6 Laue-Beugungsbild des Ni(110)-Kristalls.

Reflexion des Ionenstrahls wurde nur festgestellt,wenn die Oberflächen über längere Zeit durch Kathodenzerstäubung streifender H_2^+-Ionen gereinigt und atomar geglättet wurden.

Da die Umladungsmessungen bei streifender Reflexion des Ionenstrahls(Kapitel 4) wegen der kleinen Winkel auch eine makroskopisch ebene Oberfläche verlangten,schied das Präparationsverfahren durch Elektropolieren zugunsten mechanischer Bearbeitung aus.

Als das für die Präparation günstigste Verfahren hat sich herausgestellt:

- Vororientierung und Auswahl des gezogenen Ni-Einkristalls nach Anätzung in Königswasser durch Laueaufnahmen.
- Sägen der Scheibchen durch Wolframdrahtsäge mit Schmirgel.
- Grobschliff auf Planscheibe mit Korund der Körnung 400/cm² und Feinorientierung durch Ausmessen der Lauereflexe.
- Feinschliff mit Körnung 1200/cm².
- Polieren auf Log-Tech Poliermaschine auf bis $0{,}01^o$ ebener Pb/Zn Scheibe mit Diamantpulver von erst 7 µm ,dann 1 µm.
- Drei bis viermaliges zweistündiges Tempern auf 1200^oC im Hochvakuum ($1o^{-6}$mbar) und,nach der langsamen Abkühlung von ca.4 h, Polieren mittels Filzscheibe (Läppen)und Diamantpulver von 1µm und 0,25 µm bei geringem Auflagedruck.
- Abschließendes einstündiges Tempern bei 1300^oC im UHV durch Elektronenstoßheizung 6 keV,10mA,und anschließende 10-20 stündige Kathodenzerstäubung mit 0,5 µA/mm² 5keV H_2^+-Ionen unter streifenden Winkeln und gelegentlicher Kontrolle der Oberflächenbedeckung durch Augerspektroskopie (s.Abschnitt ID).

D)Die Oberfläche:

1)Augeranalyse:

Die Verunreinigung der Oberfläche und zweier darunterliegenden Atomlagen könnte mit einem 80 mm beweglichen Varian Augerelektronenspektrometer während,wie auch außerhalb der Bestrahlung durch Wasserstoffionen gemessen werden.Dabei wurden die durch einen dünnen (0,1mm) auf die Oberfläche senkrecht einfallenden Elektronenstrahl von 2 keV und 20 µA aus Augerübergängen stammenden Sekundärelektronen über einen Zylinderkondensator der Energie nach analysiert, und als nach der Energie differenziertes Signal registriert. Die für die einzelnen chemischen Elemente charakteristischen Übergänge erscheinen im Energiespektrum der Sekundärelektronen

als scharfe Maxima.Ihre Höhe ist in etwa der Konzentration der entsprechenden Elemente proportional(32).

Die Übergänge werden durch drei indizierte Buchstaben bezeichnet.Der erste gibt die Elektronenschale an,die im primären Stoß ein Loch durch Ionisation erhält.Es wird durch ein Elektron besetzt,das aus einer Schale stammt,die durch den zweiten Index bezeichnet wird.Der dritte Buchstabe nennt die Schale,aus der ein Elektron mit der Differenzenergie emittiert wird.Die Schalen sind als K,L,M... und V für das Valenzband bezeichnet,ihr eventuell angehängter Index bestimmt die Unterschale.

Abb.7 zeigt drei Augerelektronenspektren für unterschiedlichen Bedeckungszustand der Ni(110) Oberfläche.Teilbild 7b) zeigt folgende Linien:

- 60 und 102 eV	MVV-Übergänge im Ni
- 716,783 u.848eV	LVV-Übergänge im Ni
- 272 eV	KLL-Übergänge in C
- 381 eV	KLL-Übergänge in N
- 510 eV	KLL-Übergänge in O

Eng zusammenliegende Linien,wie die drei Ni - Linien zwischen 716 und 848 eV sind durch Übergänge aus verschiedenen Unterschalen entstanden.

Die Bedeckungsgrade können aus dem Vergleich der Signalhöhen der einzelnen für die Elemente charakteristischen Linien abgeschätzt werden.

Schouten et al.(33) haben bei einer Bedeckung von Ni(110) durch eine Monolage(ML) Kohlenstoff aus vergleichenden LEED-Messungen gefunden,daß die Signalhöhen der C-272eV und der Ni-848 eV Linien mit 20% Genauigkeit gleich sind.Ähnliches ergibt sich auch für Bedeckung durch andere leichte Elemente. Daher wurden die Bedeckungsgrade der Ni(110)-Oberfläche durch C,S,N oder O durch Vergleich der Signalhöhen der oben angegebenen Linien mit der Ni-848eV Linie angegeben.

2)Kathodenzerstäubung:

Um die nach der Präparation und dem Tempern noch stark mit S und C bedeckte Oberfläche zu reinigen ohne sie zu

schädigen,wie z.B. durch Blistering bei Zerstäubung mit senkrecht einfallenden Edelgasionen größerer Dosis,wurde eine vergleichsweise sanfte Methode der Kathodenzerstäubung durch mit 2° streifend einfallende H_2^+ Ionen der Energie 5 keV und Stromdichte 0,5 μA/mm^2 verwandt.Der weitaus größte Teil der Ionen wird reflektiert,ohne in den Kristall einzudringen.

Kaminsky(34) beschreibt den zur Zerstäubung führenden Stoßprozess für H_2+ Ionen kleinerer Energie als 9,6 keV als Stoß harter Kugeln.Die übertragbare Energie hängt von der Masse der Targetatome ab.Es ist:

$$E_{max} = E_o \cdot 4M_1M_2/(M_1+M_2)^2 \qquad (1.3)$$

mit E_{max} maximale übertragbare Energie
E_o Projektilenergie
M_1, M_2 Projektil-und Targetmasse

Da die Ni-Atome außer ihrer höheren Masse stärker im Kristallgefüge,als die an der Oberfläche adsorbierten Fremdatome gebunden sind,sind die Zerstäubungsraten für die Ni Atome gegenüber denen der leichten Fremdatome C,N,S und O noch wesentlich geringer als der Faktor 5,der sich aus Gleichung (1.3) für freie Atome erwarten läßt.

Der Reinigungsprozess der Oberfläche wird durch die Abb.7 und Abb.8 erläutert.

Abb.7 a)-c)zeigt Augerspektren für die folgenden Zustände der Oberfläche:

a) Die mechanisch präparierte und getemperte Oberfläche, direkt nach dem Einbau in die Apparatur.
Sie zeigt gegenüber den kleinen Ni-Linien starke C-Linien mit Bedeckung Θ_C=4 ML ,und leichte O-und S-Bedeckung(0,3ML).

b) Nach einer Kathodenzerstäubung in der oben beschriebenen Weise über 10 h und anschließendem Tempern im UHV bei 1300°C während einer Stunde,sowie halbstündigem Aussetzen an der Atmosphäre nach der Abkühlung.
Die C-Bedeckung ist durch das Glühen auf 0,4 ML gesunken, während 1,25 ML Schwefel an der Oberfläche segregiert ist. Die O- und N-Bedeckungen rühren von der Atmosphäre her.

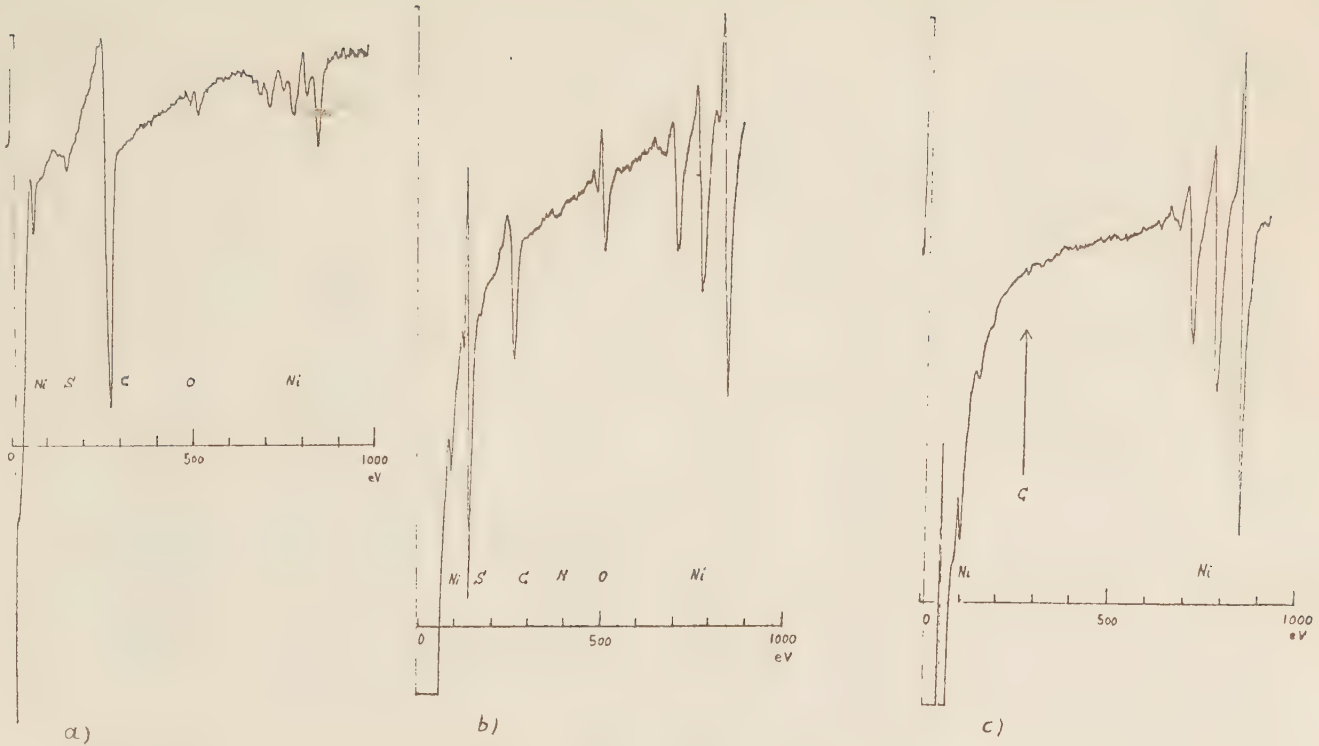


Abb.7 Augerelektronenspektren bei mechanisch präparierter Oberfläche a),nach H_2^+-Kathodenzerstäubung und Tempern b), nach weiterer Kathodenzerstäubung c).

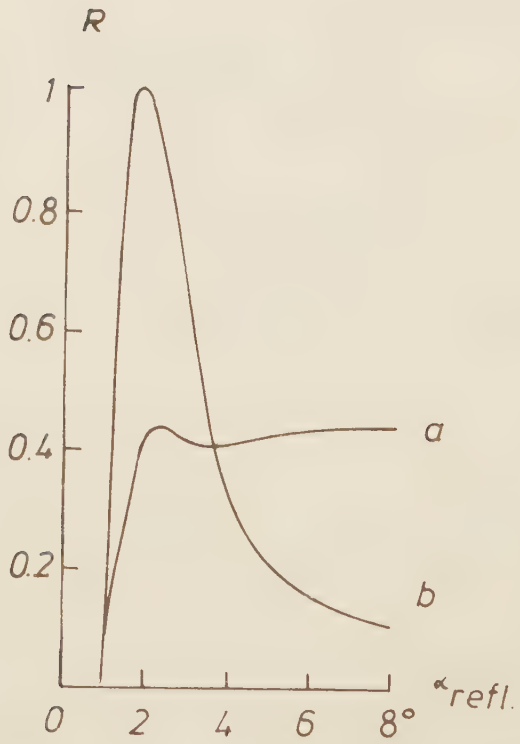


Abb.8 Verteilungen reflektierter Ionen a) vor und b) nach H_2^+ -Kathodenzerstäubung.

c)Nach weiteren 7 h Kathodenzerstäubung sind alle Fremdatomsignale nahezu bis auf Signale von C und S im Bereich von 0,01 ML verschwunden.

Läßt man nun auf eine solchermaßen gereinigte Oberfläche leichte Bedeckungen bis zu einer Monolage durch kurzen Druckanstieg oder tagelanges Stehenlassen der Apparatur im Druckbereich von 10^{-11}mbar für Methan,Sauerstoff ect. anwachsen,so ändert sich die Bedeckung θ bei Zerstäubung wie:

$$\theta(t)=\theta_o \exp(-t/t_z) \qquad (1.4)$$

Die charakteristische Zeit t_z liegt bei 0,5 min,was Zerstäubungsraten von 0,05-0,1 je streifendes H_2^+-Ion der Energie 5 keV für leichte Elemente im Einklang mit bekannten Daten(35) ergibt.

Die Reinigung der Oberflächen nach mechanischer Präparation geht wesentlich langsamer vonstatten (t_z=20 min), da die durch den Bearbeitungsprozess stark gestörten und verunreinigten Oberflächenschichten abgetragen werden müssen.

Abb.8 vergleicht Reflexionsverteilungen von unter 2^o streifend einfallenden 5 keV H_2^+-Ionen der Ni(110)Oberfläche a)vor,und b)nach 10-stündiger Kathodenzerstäubung.

E) Evakuieren

Bei der Konzeption der Meßapparatur wurde größter Wert auf die Einhaltung von Ultra-Hoch-Vakuum -(UHV)- Bedingungen im Bereich $1o^{-10}$ mbar gelegt,um sicherzugehen,daß die Meßergebnisse der Ionen-Oberflächenwechselwirkung nicht durch Fremdatombedeckungen infolge ungenügenden Vakuums verfälscht wurden.Dies erforderte,im Rezipienten Drücke von weniger als 10^{-9}mbar für H_2 und 10^{-10}mbar für aus C,N,O u.H -Verbindungen bestehendes Restgas ,auch während des Meßvorgangs einzuhalten.Die Analyse der Partialdrücke konnte mit einem Quadrupol-Massenspektrometer der Empfindlichkeit $1o^{-13}$mbar und Massenauflösung M/M=1/400 der Firma Balzers vorgenommen werden.

Selbst bei einem Vakuum von $1o^{-9}$mbar bildet sich nach ca. 1 min eine Bedeckung von 5% einer Monolage.Dies ist bei Experimenten mit streifenden Ionen die obere Grenze für noch als rein zu bezeichnende Oberflächen.Da der Meßvorgang wesentlich länger als 1 min dauert,kann eine Messung unter reinen Oberflächenbedingungen nur ausgeführt werden,wenn die Abtragung durch Zerstäubung und die Wiederbedeckung durch das Restgas bei kleineren Bedeckungen als ca.0,05 ML im Gleichgewicht sind.

1)Bedeckung und Abtragung:

Die Bedeckungs- und Zerstäubungsraten sind bei einer bestimmten Bedeckung Θ im Gleichgewicht,wenn die Bedeckungszeit t_Θ gleich der charakteristischen Abtragungszeit t_z (1.4) für die Zerstäubung ist.Da weit unterhalb der Sättigung ($\Theta \ll 1$ML) $\Theta \sim t$ ist,folgt:

$$t_\Theta = c_1 \Theta / p \qquad (1.5)$$

mit

c_1 = $1o^{-6}$ mbar s/ML nach (89)

p = Druck im Rezipienten in mbar

Die charakteristische Abtragungszeit t_z ist

$$t_z = e/c_2 j A_o^2 \qquad (1.6)$$

mit c_2 = Zerstäubungsrate

e Elementarladung

j Ionenstromdichte

A_o^2 Atomare Einheitsfläche.

Damit folgt

$$\Theta = ep/c_1 c_2 j A_o^{\,2} \qquad (1.7)$$

für die Gleichgewichtsbedeckung.Sie ist für typische Metalle mit $A_o^2 = 0,1 nm^2$ und Ionenstromdichten in $\mu A/mm^2$ bei einer Zerstäubungsrate von 0,1:

$$\Theta = (p/1o^{-7}\ \text{mbar})/(j/\mu A/mm^2) \quad (\text{in ML}) \qquad (1.8)$$

Dies ergibt bei einer Stromdichte von $0,5\ \mu A/mm^2$

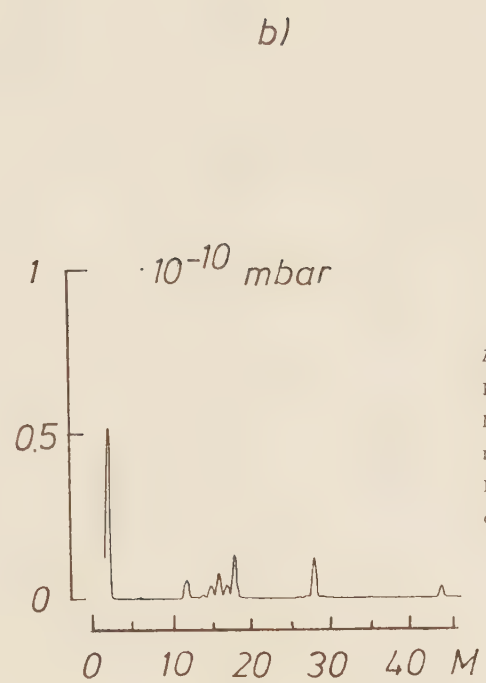


Abb.9
Partialdruck-Massenspektrum mit a),und ohne b) Betrieb der Ionenquelle.

und einem Druck von $1o^{-9}$mbar eine Bedeckung von ca.0,02 ML,und die Forderung,daß mit einer gewissen Sicherheitsreseve der Restgasdruck im Bereich kleiner 10^{-10}mbar,und der H_2-Druck wegen der besseren Abtragung im Bereich unter 10^{-9} mbar sein sollte ,um während der Experimentes die Reinheit der Oberfläche aufrechtzuerhalten.Dies ließ sich durch die Konstruktion der Apparatur erreichen,die Gleichgewichtsbedeckung blieb bei H_2 Drücken von $2\cdot10^{-10}$mbar und Restgasdrücken von $5\cdot10^{-11}$mbar während der Messung unter 0,01 ML.

2)Vakuumbedingungen:

Die Vakuumapparatur ist einschließlich der Ionenquelle UHV-kompatibel mit Metalldichtungen und Werkstoffen versehen,die bis in den $1o^{-12}$ mbar Bereich verwendet werden können,wie V2A,Hartglas,Quarz,Al_2O_3,Kupfer und Aluminium. Sie ist in drei Bereiche unterteilt,die durch Druckstufen voneinander getrennt sind:

- Die Ionenquelle mit H_2-Drücken von $2,2\cdot10^{-2}$ mbar im Betriebszustand,$1o^{-7}$mbar außer Betrieb und niedrigerem Restgasdruck.
- Der Ionenkanal als Druckstufe mit einem Durchlaß von $0,3\cdot10^{-2}$ l/s zwischen Quelle und Strahlführungsbereich.
- Der Strahlführungsbereich, der mit einem 110 l/s - Turbomolekular-Pumpstand bei H_2-Drücken von $0,7\cdot10^{-6}$mbar bei,und $<10^{-9}$mbar ohne Betrieb der Ionenquelle ist;der Restgasdruck liegt unter 10^{-9} mbar.
- Die dritte Strahlblende als Druckstufe zwischen Strahlführungsbereich und Rezipient mit Durchlaß $3\cdot10^{-2}$l/s. Sie kann unter Vakuum so verschoben werden,daß sie eine Öffnung (100 l/s) zur Evakuierung des Rezipienten durch die mechanischen Pumpen freigibt.
- Der Rezipient mit einem H_2 Druck von $2\cdot1o^{-10}$mbar bei, und $0,5\cdot10^{-10}$mbar ohne Betrieb der Ionenquelle,und ca. $3\cdot1o^{-11}$mbar Restgasdruck.Ein Massenspektrum der Gassorten mit ihren Partialdrücken zeigt Abb. 9 ohne a) und mit Betrieb b) der Ionenquelle. Die Partialdrücke von CH_4(M=12-16),H_2O(M=17,18),N_2 und

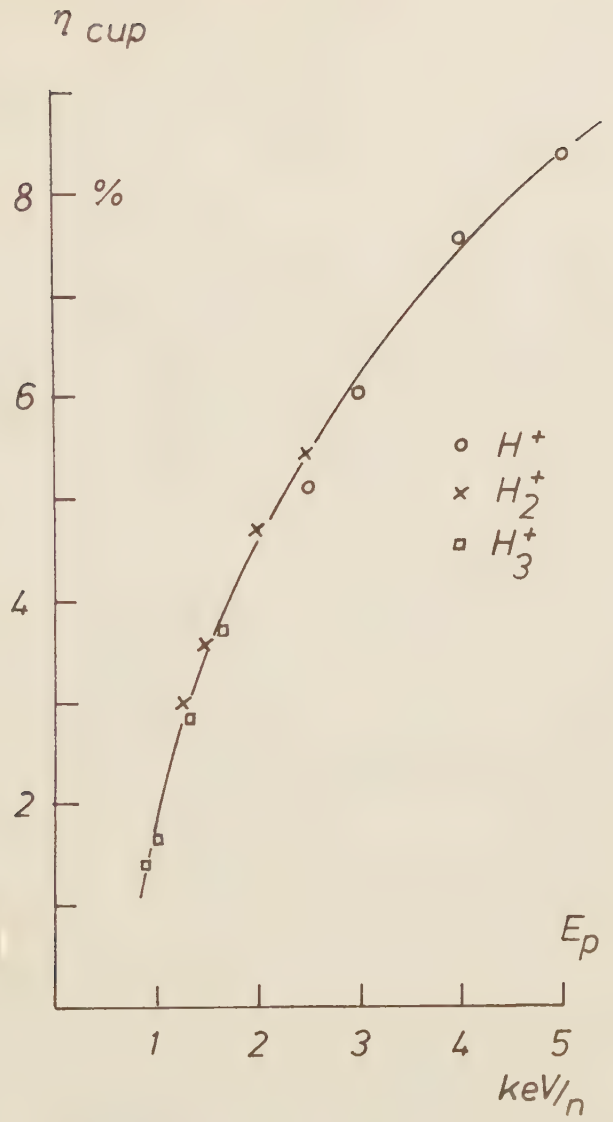


Abb.10 Sekundärelektronen-Ausbeute des Ionen- und Neutralteilchenauffängers bei Einfall von H^+, H_2^+, H_3^+ -Ionen.

CO (M=28) und CO_2 (M=44) bleiben unverändert. Die Spektren enthalten allerdings keinen Korrekturfaktor der Größenordnung 2 für den H_2-Druck.
Das Pumpsystem bestand aus einer Ionengetterpumpe (230 l/s) und einer Titanverdampferpumpe mit Kühlschild (4000 l/s).

F) Nachweisvorrichtungen für Ionen, Neutralteilchen und Elektronen:

1) Trennkondensator:

Zur Ablenkung der Ionenstrahlen im Elektrischen Feld wurde ein ebener Plattenkondensator, wie in Abb.12 und 1 angedeutet ist, konstruiert. Er ist mit einer Eintrittsblende von 0,4mm·1,5mm versehen, und kann in den Strahlengang des reflektierten, wie auch des ankommenden Strahls geschoben werden. Dies erlaubt eine Diskriminierung des Strahls nach Energie und Ladung. Die Verzerrung bleibt für monoenergetische Ionen bis zu Ablenkungen von ±10° unter der Meßgrenze.

2) Ionen-und Neutralteilchenauffänger:

Unterhalb des Trennkondensators, im Abstand von ca. 90 mm von der Probenmitte, ist ein beweglicher, abgeschirmter Auffänger (Cup) mit Eintrittsspalt von 0,4 mm x 12 mm, und einer Öffnung von 0,25° x 7,7° gegenüber dem Kristall. Er ist in Abb.13 angedeutet, und in Abb.14 im Schnitt gezeichnet. Er kann über eine Durchführung motorisch mit 0,3° /s oder manuell mit einer Genauigkeit von 0,01° bewegt werden. Die Bewegungsrichtung ist 5° gegenüber der Vertikalen geneigt, um die Verzerrung gegenüber einer Kreisbahn bei dem mittleren Reflexionswinkel des Srahls von 2,5° von der meist senkrechten Oberfläche im Bewegungsbereich von ±10° des Cups möglichst gering zu halten.
Der eigentliche Auffänger aus V2A ist von einer Abschirmung umgeben, deren einstellbares Potential Sekundärelektronen, die durch Ionen im Auffänger ausgelöst werden, unterdrücken läßt. Die für die Eichung der Ionenströme richtige Potentialdifferenz zwischen Abschirmung und Auffänger ist ermittelt, wenn ein Neutralstrahl kein Signal mehr

produziert.Dann werden die aus dem Auffänger emittierten Elektronen durch die an der Abschirmung von rückgestreuten Teilchen ausgelösten Elektronen gerade kompensiert.Eine zu große negative Abschirmspannung ergibt eine Überkompensation in Form eines negativen Stroms auf den Auffänger.Die Abschirmspannung liegt bei -10 bis -20 V bei Energien von 1,7 bis 6,7 keV/Nukleon.

Der Nachweis der Neutralteilchen von 1,7-6,7 keV erfolgte über die Intensität der am V2A-Auffänger ausgelösten Sekundärelektronen ,die bei geerdeter Abschirmung einen positiven Strom ergaben.Der Auffänger hat nach kurzer Reinigungszeit durch Kathodenzerstäubung (einige Minuten) eine konstante Empfindlichkeit für Neutralteilchen einer bestimmten Energie und eines bestimmten Einfallswinkels. Die Energieabhängigkeit kann der Eichkurve der Abb. 10 ,die für 0,85 - 5 keV/Nukleon H^+ ,H_2^+,und H_3^+ Ionen die Auslöserate pro Nukleon angibt.
Sie liegt innerhalb der Meßgenauigkeit für alle Teilchensorten auf einer Kurve,die nur von der Energie pro Nukleon oder der Geschwindigkeit abhängt,wie an ähnlichen Messungen bereits vielfach gezeigt(36).Daher kann eine in den Grenzen von 10% gleiche Auslösung von Sekundärelektronen durch H^+ Ionen und H-Atome gleicher Geschwindigkeit angenommen werden.Der Auffänger zeigte eine leichte Winkelabhängigkeit (bis 15%) ,die bei der Eichung berücksichtigt wurde.

3)Elektronenauffänger:

Ein abgeschirmter zylindrischer Auffänger ist auf einer Kreisbahn um den Kristallmittelpunkt mit einem Radius von 40 mm in der Reflexionsebene der Ionen geführt(s.Abb.12). Er läßt sich von 0-145°,bezogen auf die Richtung streifender Reflexion der Ionen,motorisch mit 1,5°/s,und manuell mit einer Genauigkeit von 1° bewegen.Seine Öffnung war 2° in Reflexionsrichtung,und ±9° senkrecht dazu.Dies erlaubte die Messung der räumlichen Verteilung der durch die streifenden Ionen ausgelösten Elektronen in der Reflexionsebene. Die energetische Verteilung der Elektronen konnte über die Abschirmspannung bestimmt werden.

Die Bewegung konnte motorisch mit 1,5°/s oder manuell mit einer Genauigkeit von 1° ausgeführt werden.

4)Nachweiselektronik und Aufzeichnung:

Die in den Auffängern durch die reflektierten Ionen, Neutralteilchen oder Elektronen ausgelösten Ströme wurden von einem besonders gegenüber der Hochfrequenzeinstrahlung des HF-Senders der Ionenquelle unempfindlichen elektronischen Strom-Spannungswandler verstärkt,der völlig umschlossen in einem μ-Metallgehäuse eingebaut war.Er war mit einem FET-Operationsverstärker hoher thermischer Stabilität und geringer zeitlicher Drift als zentralem Baustein bestückt,und lieferte bei drei einstellbaren Verstärkungen Spannungen von 0,01 , 0,1 oder 1 mV bei Strömen von 10 pA. Sein Eigenrauschen entsprach einem Eingangsstrom von 1 pA.

Die Ausgangsspannungen konnten über einen Hewlett-Packard x-y-Schreiber mit einer Empfindlichkeit bis zu 0,05 mV/cm aufgezeichnet werden.

Das Potential der Auffänger ließ sich über den Eingang des potentialfreien Verstärkers zwischen ±500 V einstellen.

Die Empfindlichkeit der Anordnung Schreiber-Verstärker-Auffänger betrug 1 pA.Die Primär-Ionenströme waren vor der Reflexion an der Oberfläche 0,3 μA.Nach der Reflexion an der Oberfläche wird die Intensität der Teilchen,die in den Auffänger gelangen,durch Aufstreuung zwischen dem Kristall und Auffänger auf 0,1 verringert.Somit ließen sich Umladungsverhältnisse bis zu ca.$3 \cdot 10^{-5}$ des einfallenden Strahls nachweisen.Dadurch konnte der bei der Reflexion unter sehr kleinen Winkeln an der Oberfläche entstehende sehr geringe H^- Anteil von $3 \cdot 10^{-4}$ mit einer Genauigkeit von 10%, sowie die Überlebenswahrscheinlichkeit von ca.10^{-4} der H_2^+ -Ionen mit 30% Genauigkeit noch bestimmt werden,während die positiven Ströme,der reflektierten Protonen oder Neutralteilchen(über die Sekundärelektronen)mit einigen Prozenten Genauigkeit gemessen werden konnte.

5)Strom-und Spannungsversorgungen:

Die Strom-und Spannungsversorgung der Ionenquelle,Ionenoptik, des Trennkondensators sowie aller Potentialeinstellungen erfolgte durch hochstabilisierte Netzgeräte mit Toleranzen

von 10^{-4} und mit einer Genauigkeit von besser als 1%.(Die Geräte stammten von der Fa.Heinzinger).Alle Geräte waren gegenüber der Stör-Einstrahlung des HF-Senders abgeschirmt.

II) Die Versuchsanordnung und die Meßgenauigkeiten:

A) Messung der Sekundärelektronenausbeute bei unterschiedlichem Einfallswinkel von Wasserstoffionen auf die Oberfläche:

Die Meßanordnung ist in Abb. 11 wiedergegeben.Der H^+,H_2^+ oder H_3^+ -Strahl der Energie 5 keV und der Stromstärke von jeweils 15o,3OO oder 75 nA und der Breite O,4 mm x 1,5 mm trifft in der Einfallsebene (111) mit einem Winkel ϑ gegenüber der Senkrechten auf die Ni(11O)-Oberfläche.Die Strahlbreite konnte bei Messungen mit mit sehr flachen Einfallswinkeln $\vartheta > 80^o$ auf O,1mm x 1,5mm verkleinert werden, um die Elektronen ausschließlich an der Oberfläche auszulösen.Die Ströme der ausgelösten Elektronen,die vom Winkel ϑ,wie auch von der Vorspannung der Probe abhängen, und der konstante Ionenstrom konnten,wie in (2,I A) eingehend ausgeführt,über die isolierte Kristallhalterung und die Nachweiselektronik gemessen werden.Die Aufzeichnung erfolgte mit dem x-y-Schreiber,mit dem Strom als y-,und dem Einfallswinkel ϑ,dem Drehwinkel am Goniometer,als x-Koordinate.

Die Eichung der Elektronenausbeute η erfolgte über den Strom der einfallenden Ionen,der mit ± 5% Genauigkeit durch den Ionenauffänger bestimmt wurde.

Die zeitliche Schwankung des Ionenstrahls während der Zeitdauer einer Messung von ca.1-2min betrug 1%,während die Strommessung und Potentialeinstellungen vernachlässigbar kleine Fehler ergaben.

Die gegen den Einfallswinkel aufgetragenen Ausbeutekurven der Sekundär-Elektronenemission des Kapitels 2 A1 sind daher in sich auf 1%,absolut auf 5% genau.

B) Messung der Energieverteilung der durch die Wasserstoff-Ionen ausgelösten Elektronen:

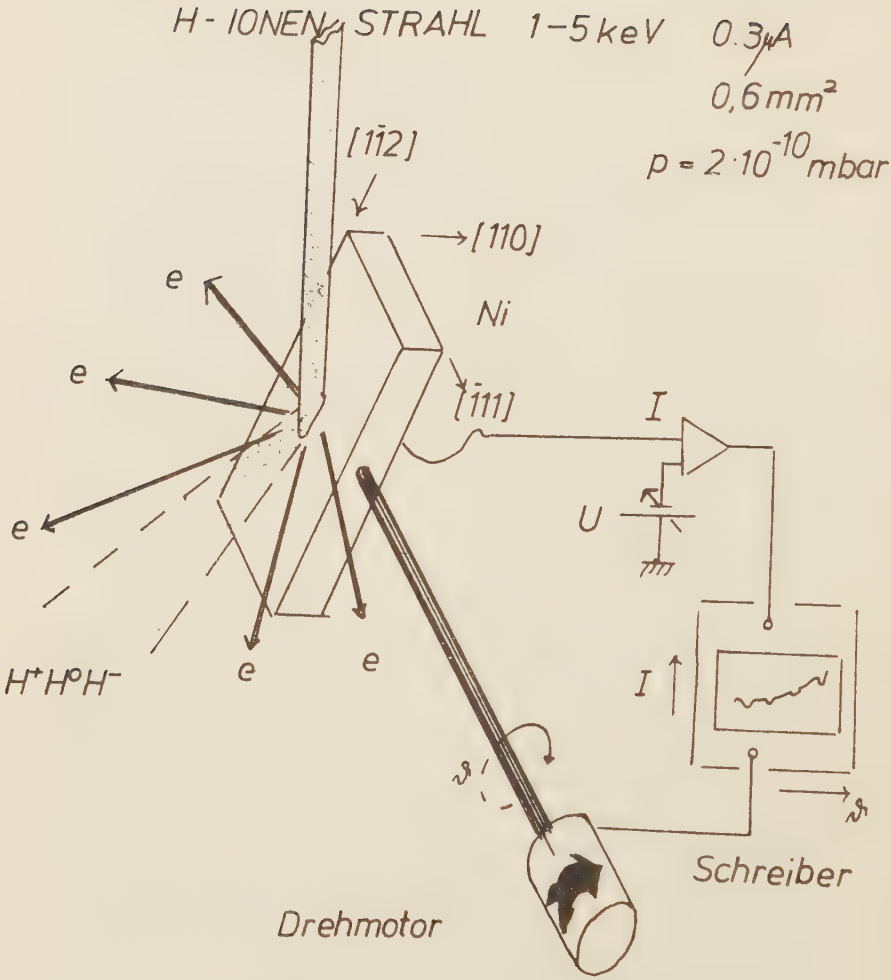


Abb.11 Meßanordnung für die Sekundärelektronen-Ausbeute von Ionen unterschiedlicher Einfallswinkel ϑ.

Diese Messung wurde ebenfalls mit der Anordnung der Abb.11 durchgeführt,wobei bei festem Einfallswinkel und fester Energie der Ionen die Gegenspannung U zwischen Rezipient und positiver Probe zeitlich variiert wurde und auf der x-Koordinate des Schreibers aufgetragen wurde.
Der von der Probe in der Form

$$i(U) = i_p + \int_{eU}^{\infty} i_{el}(E)dE \qquad (1.9)$$

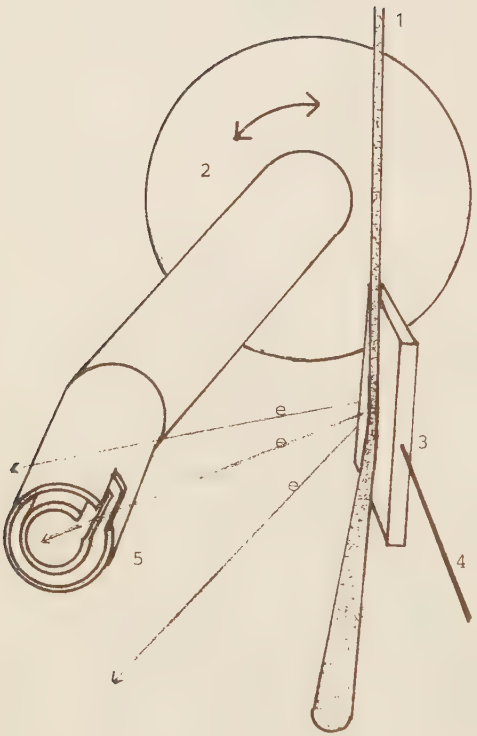
mit i_p Ionenstrom
i_{el} Elektronenstrom

erhaltene Strom i(U) wurde elektronisch differenziert, und ergab $i_{el}(eU)$,den Strom der Sekundärelektronen mit Energie $E_{el}=eU$,also die energetische Verteilung der ausgelösten Elektronen.Sie wurde in der y-Koordinate des Schreibers aufgetragen.

Das für Elektronen anziehende Potential der Probe sammelt "rückläufige Elektronen",die durch rückgestreute Teilchen an den Gefäßwänden ausgelöst wurden.Sie wurden durch Differenzmessung eliminiert.

Die Intensität der rücklaufigen Elektronen betrug bei streifendem Einfall der Ionen infolge des großen Abstands (ca.1m) des Ortes ihrer Auslösung nur 5% der von der der Probe emittierten Elektronen.Sie war bei senkrechtem Einfall der Ionen auf die Oberfläche erheblich größer. Einerseits wegen der bis zu 7-mal geringeren Auslösung, andererseits durch die größere Nähe der Gefäßwände in den Richtungen der rückgestreuten Teilchen.Die Intensität der rückläufigen Elektronen wurde dadurch bestimmt,daß eine kleine Metallscheibe aus V2A mit glatter Oberfläche in den Strahlengang der einfallenden Ionen geschoben wurde, und die durch die rückgestreuten Teilchen ausgelösten Elektronen ,die auf die vorgespannte Probe trafen,gemessen wurde.

Die Genauigkeit der Energieverteilungskurven ist ±5% für streifenden,und ±10% für senkrechten Einfall der Ionen.



1 H-Ionenstrahl

2 Drehvorrichtung

3 Ni(110)-Kristall

4 zum Goniometer

5 abgeschirmter Elektronenauffänger

Abb.12 Meßanordnung für die räumliche und energetische Verteilung der durch die Ionen ausgelösten Elektronen

C) Räumliche und energetische Verteilung der durch streifende Wasserstoffionen ausgelösten Elektronen:

Abb. 12 zeigt die Anordnung, mit der die bei streifendem H-Ioneneinfall längs der [211]-Richtung des Ni (110) -Einkristalls in der Reflexionsebene (111) des Ionenstrahls ausgelösten Elektronen der Emissionsrichtung und Energie nach bestimmt wurden. Die in den auf einer Kreisbahn in der Reflexionsrichtung beweglichen Auffänger (5), der im Halbschnitt dargestellt ist, gelangenden Elektronen haben je nach Emissionswinkel α_{el}, der auf die Richtung des streifenden Ionenstrahls auf der Oberfläche bezogen ist, Intensitäten von 0,1-10nA. Die Energieverteilung der Elektronen wurde durch Anlegen eines Gegenfeldes zwischen der geerdeten Abschirmung und dem inneren Auffänger ermittelt.

Die kleinen Ströme der unter größeren Winkeln an der Ni (110) Oberfläche rückgestreuten Ionen wurden durch Anlegen einer kleinen positiven Spannung von 25 V an der Probe, die die Emission der Sekundärelektronen verhinderte, gemessen, und eliminiert; sie spielen nur bis $\alpha_{el}=20^{o}$ eine Rolle.

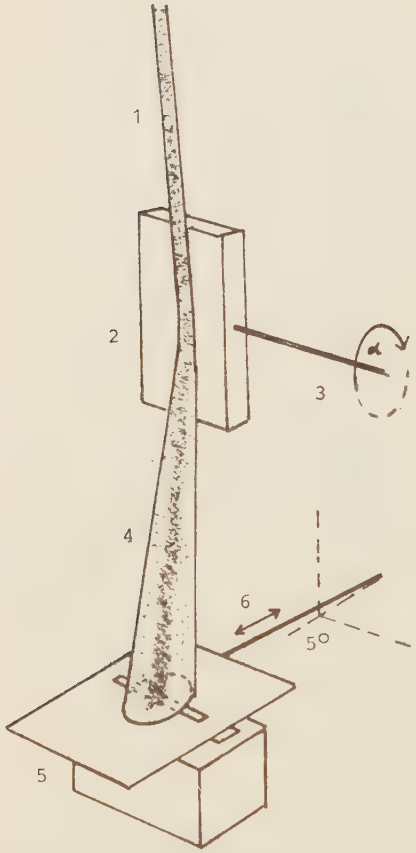
Die Genauigkeit der Messung betrug $\pm$5% bei der Messung der räumlichen Verteilung der Elektronen aller Energien, und $\pm$20% für die energetischen Verteilungen in einzelnen Richtungen. Die Winkelauflösung ist durch magnetische Restfelder von $\approx$ 0,1G auf 5^{o} begrenzt.

D) Reflexion des Ionenstrahls:

Die Verteilung des an der Ni(110)-Oberfläche unter kleinen Winkeln reflektierten Ionenstrahls wurde mit einer Anordnung, wie in Abb. 13 dargestellt, gemessen.

Die Verteilung bestand zu ca.99%, also weit überwiegend aus H-Atomen. Sie wurden nach der Eichkurve der Abb.10 mit grössenordnungsmäßig 5% Empfindlichkeit vom Ionen-und Neutralteilchenauffänger (5) nachgewiesen. Die Ströme der positiven Ionen waren eine, der negativen Ionen zwei Größenordnungen kleiner.

Ströme durch an der Ni(110) ausgelöste Sekundärelektronen wurden durch eine positive Vorspannung der Probe von 25 V



1 H-Ionenstrahl

2 Ni(110)-Kristall

3 zum Goniometer;Einstellung des Reflexionswinkels

4 reflektierter Strahl

5 Ionen-und Neutralteilchenauffänger mit schmalem Eintrittsspalt

6 Bewegungsrichtung des Auffängers,um 5^{o} gegen die Horizontale verkippt

Abb.13 Meßanordnung zur Reflexionsverteilung der Ionen und Neutralteilchen

unterdrückt.Die Reflexionsverteilung,die abgesehen von der Abschattung durch die Oberfläche rotationssymmetrisch zur Reflexionsrichtung war,wie durch ein in den Strahlengang der Verteilung verschiebbares Quarzscheibchen visuell überprüft werden konnte,wurde bei festem Reflexionswinkel durch die Bewegung des Auffängers mit dem schmalen Eintrittsspalt 0,4mm x 12mm eindimensional abgefahren.Dies war der technischen Einfachheit halber nicht zu umgehen,die so erhaltene Verteilung ist gegenüber einer rotationssymmetrischen Darstellung aber nur geringfügig verbreitert.

Die Verteilung der positiv emittierten Ionen konnte bei einer negativen Abschirmspannung des Auffängers von, je nach Energie der Teilchen, 12-20 V durch die Unterdrückung des Signals von den Neutralteilchen, erhalten werden,wobei ein kleiner Anteil durch negative Ionen von ca.10% bei 5 keV berücksichtigt werden mußte. Die Trennung der emittierten H^+ und H^- Ionen gelang mit dem Trennkondensator,(vgl.Abb.14)der ohne Eintrittsspalt in den Strahl der reflektierten Teilchen bewegt werden konnte.

Die Genauigkeit der Reflexionswinkel-Einstellung betrug über den Goniometer $0,1^o$,die Winkelangabe des reflektierten Strahls war über die Öffnung des Auffängers aus $0,25^o$ genau,während die Ungenauigkeit der Strommessungen im Auffänger absolut ca.10% betrugen,und innerhalb einer Reflexionsverteiung wegen der verhältnismäßig hohen Ströme vernachlässigbar klein waren.

E)Messungen zur Umladung des reflektierten Ionenstrahls:

Die Intensität der verschiedenen Ladungszustände und die Überlebens-Wahrscheinlichkeit des H_2^+-Ions nach der Reflexion des Ionenstrahls wurde in der Anordnung der Abb.14 gemessen.

Der Reflexionswinkel wurde über das Goniometer eingestellt.

Die im elektrischen Feld des Trennkondensators ,der mit seinem Eintrittsspalt in das Maximum des reflektierten Strahls gebracht wurde,unterschiedlich abgelenkten Ladungsanteile wurden von dem beweglichen Ionen-und Neutralteilchenauffänger (Cup) in Form eines Ladungsspektrums

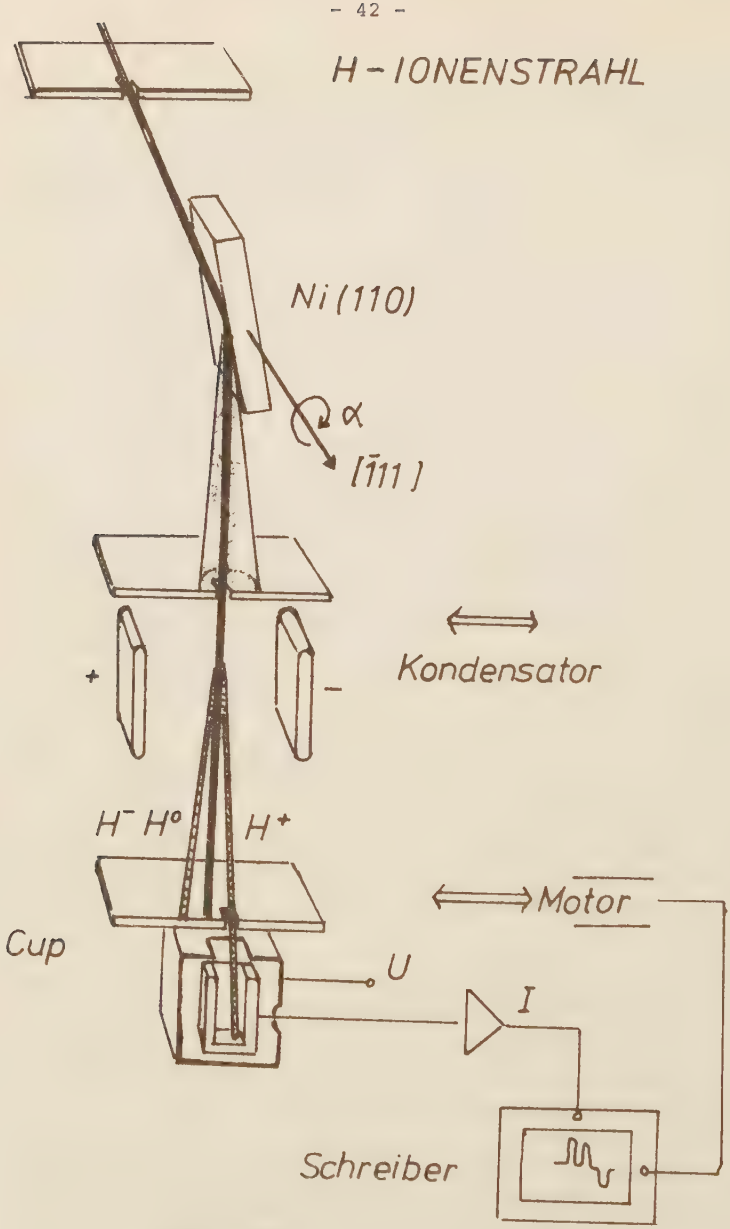


Abb.14 Meßanordnung zur Umladung des reflektierten Ionenstrahls

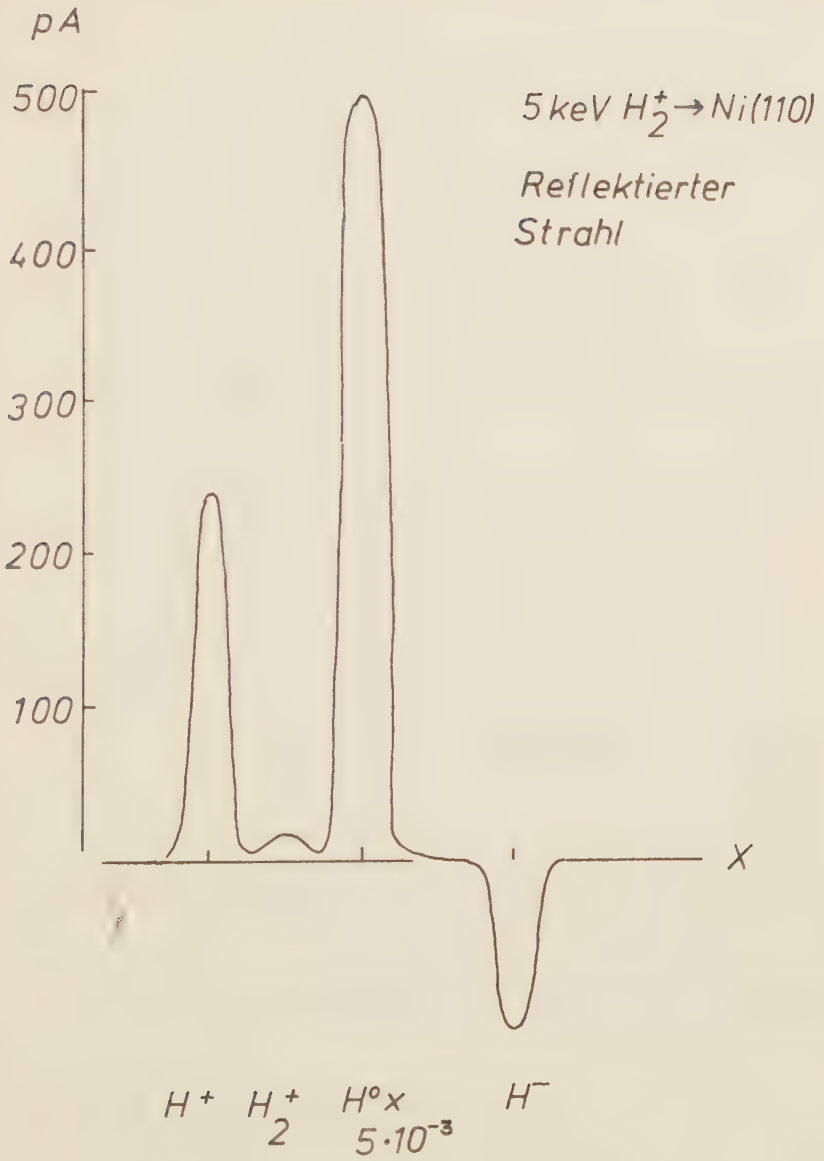


Abb.15 Ladungsspektrum eines reflektierten Ionenstrahls

in Verbindung mit dem x-y-Schreiber registriert. Ein solches Ladungsspektrum zeigt für 5 keV H_2^+ Ionen nach der Reflexion an der Ni (110) Oberfläche die Abb. 15 .Die Intensität der Neutralteilchen,die bei jeder Messung noch gesondert mit geerdeter Abschirmung nach der Eichkurve der Abb.10 bestimmt wurde,ist durch Anlegen einer Abschirmspannung am Auffänger auf ca.5% reduziert. Die H^+,H^-und H_2^+-Ströme,die durch die Eintrittsspalte von Trennkondensator und Auffänger gelangen,werden mit 100% nachgewiesen.Die Genauigkeit der Umladungsmessung wird von der Genauigkeit der Neutralteilcheneichung bestimmt.Sie ist 5%, wenn die Ionenströme 20 pA nicht unterschreiten.Dies ist nur bei der Bildung von H^- -Ionen unter sehr flachen Reflexionswinkeln,und bei der Emission von H_2^+-Ionen nach einer Reflexion von H_2^+-Ionen der Fall.Die Genauigkeit beträgt dann 15% bzw.35%.

Die Energie der einfallenden Ionen wurde durch eine Erhöhung der Anodenspannung der Ionenquelle,die die Strahlenergie bestimmt,um 4% so eingestellt,daß die Verluste von 1% innerhalb der Ionenquelle,und an der Oberfläche bei der Reflexion von im Mittel 3% (s.Kap.3,C) so ausgeglichen wurden,daß die angegebenen Energien sich jeweils auf die Energie des reflektierten Strahls beziehen.

F)Messung des Energieverlustes bei der Reflexion:

Die Messung des Energieverlustes wurde ebenfalls in der Anordnung der Abb.14 unternommen,wobei die räumliche Ablenkung der reflektierten H^+ und H^- -Ionen im Feld des Trennkondensators mit der Ablenkung des Primärionenstrahls nach Entfernung der Probe aus dem Strahlengang verglichen wurde.

Durch Serienmessungen wurde eine Genauigkeit von ±1% erreicht;sie lag in der selben Größenordnung wie der Energieverlust der Ionen bei der Reflexion.

KAPITEL 2

Elektronenauslösung durch Ionen

In diesem Kapitel wird über Messungen,bestehende Theorien und Interpretationen von Elektronen,die durch niederenergetische Wasserstoffionen ($v_p < v_o$) an reinen entmagnetisierten Ni(110) Oberflächen ausgelöst werden,berichtet.Es ist v_p die Ionengeschwindigkeit und $v_o=2,18\cdot10^8$cm/s.

Der erste Teil befasst sich mit der Ausbeute an Sekundärelektronen bei Ioneneinfall mit unterschiedlichen Richtungen und Energien,sowie mit der Rückstreuung dieser Ionen. Dabei wird besonders auf die Anisotropie der Elektronenauslösung,die durch die einkristalline Struktur gegeben ist,eingegangen.

Im zweiten Teil wird die Energieverteilung der im gesamten Raumwinkel gestreuten emittierten Elektronen bei unterschiedlichen Einschußbedingungen der Ionen untersucht,insbesondere die Auslösung bei streifender Inzidenz.

Im dritten Teil werden Messungen dargestellt,die die räumliche und energetische Verteilung der Sekundärelektronen beschreiben,die von streifenden Ionen an der Oberfläche ausgelöst werden.Dazu wird eine einfache Vorstellung entwickelt, die den Stoß von freien Elektronen an der Oberfläche mit dem Proton unter Berücksichtigung der Eigenbewegung des Elektrons und der Abschirmung des Coulombfelds durch das Elektronengas zum Gegenstand hat.

Dabei zeigte sich,daß die gemessenen räumlichen und energetischen Verteilungen der Elektronen zwanglos aus diesen Vorstellungen abgeschätzt werden können.

Da der Bedeckungszustand der Oberfläche mit Fremdatomen die Auslösung der Sekundärelektronen in der Intensität wie auch in der Energieverteilung stark beeinflusst,sind vergleichende Messungen an reinen und bedeckten Oberflächen durchgeführt worden.

Als weiterer Vergleich wurden Messungen an Ni und dem Halbleiter Si herangezogen.Die festgestellten Unterschiede werden mit dem Vorhandensein freier Ladungen an der Metalloberfläche bei Ni in Verbindung gebracht.

Nach Bohr(43)wird die Theorie,die zur Beschreibung von Stößen zwischen Elektronen und Protonen angewendet werden darf,durch die Größen Stoßdurchmesser b (s.Gl.(3.4)),de Broglie Wellenlänge des Elektrons $\lambda=2\pi\lambda\!\!\!^{-}=h/p$ mit dem Impuls p des Elektrons,und die Abschirmlänge l_s bestimmt.

So ist die Bedingung für die Anwendbarkeit klassischer Theorien $b\gg\lambda\!\!\!^{-}$,und bei Vorhandensein einer Abschirmung zusätzlich $l_s\gg\lambda\!\!\!^{-}$.Das Stoßgesetz ist für $l_s\gg\lambda\!\!\!^{-}$ klassisch wie quantenmechanisch in erster Bornscher Näherung das bekannte Rutherfordsche Stoßgesetz,das für $l_s\gtrsim\lambda\!\!\!^{-}$ von Mott (90)modifiziert wurde.Für $l_s\ll\lambda\!\!\!^{-}$ wird die Streuverteilung isotrop,der Stoß kann mit einem Stoß "harter Kugeln"verglichen werden.Für $\sqrt{b/l_s}<b/\lambda\!\!\!^{-}<b/l_s$ ist weder Bornsche Näherung noch die klassische Vorstellung gültig.Dieser Bereich ist durch inelastische Stöße gekennzeichnet,wie zum Beispiel Anregungen und Umladungen.

In diesem Kapitel wird der Stoß schneller Leitungselektronen mit Protonen betrachtet.Die Relativgeschwindigkeiten liegen bei $w=1,3v_o$,die Abschirmlängen bei a_o. Die Wellenlänge der Elektronen folgt zu $\approx 0,75\ a_o$,der Stoßdurchmesser ist $b\approx\lambda\!\!\!^{-}$ .Dies erlaubt die Anwendung der Streuformel (2.45) für das abgeschirmte Coulombpotential.

I)Einfluß der Kristallstruktur auf die Elektronenauslösung durch die Wasserstoffionen

A)Die Messungen:

Abb. 16 zeigt zunächst die Geometrie der Meßanordnung für den Ionenstrahl und die Ni(110)-Oberfläche mit den Richtungen $[00\bar{1}]$, $[\bar{1}10]$, der Strahlrichtung bei streifendem Ioneneinfall $[1\bar{1}2]:\vec{k}_p$,und der Drehrichtung $[\bar{1}11]$ in der Oberfläche,der Senkrechten $[\bar{1}\bar{1}0]$: $\vec{n}$,und der Drehebene $(\bar{1}11)$, die durch die Richtungen $[1\bar{1}2]$ und $[\bar{1}\bar{1}0]$ aufgespannt wird. Der Kristall kann um die $[\bar{1}11]$-Richtung gedreht werden,dadurch ändert sich die Inzidenz des Ionenstrahls,der beim Drehwinkel $\vartheta=0$ senkrecht einfällt.

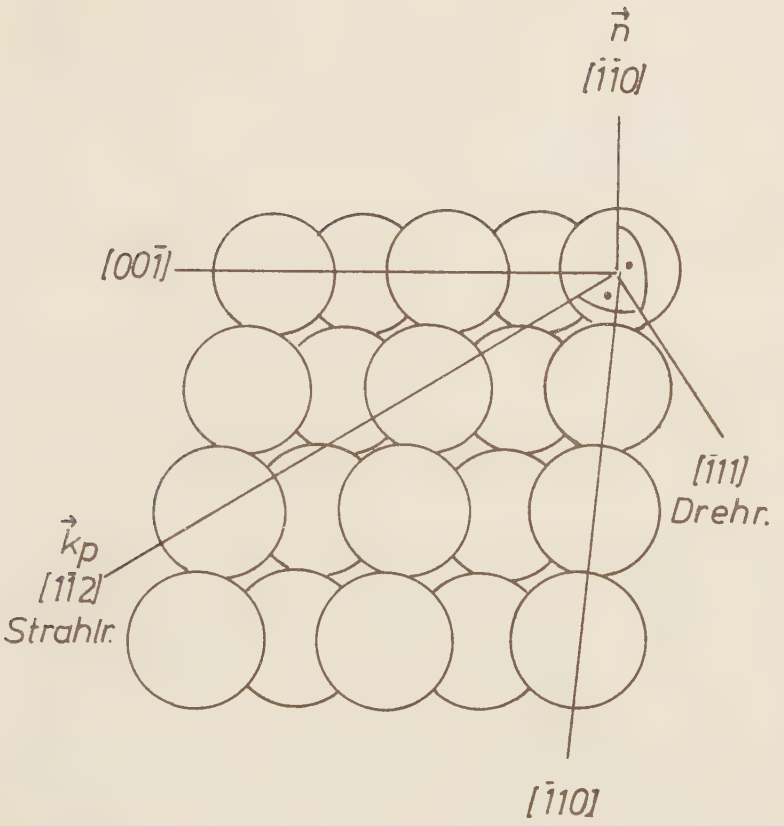


Abb.16 Geometrie der Ni(110)-Oberfläche und des Ionenstrahls.

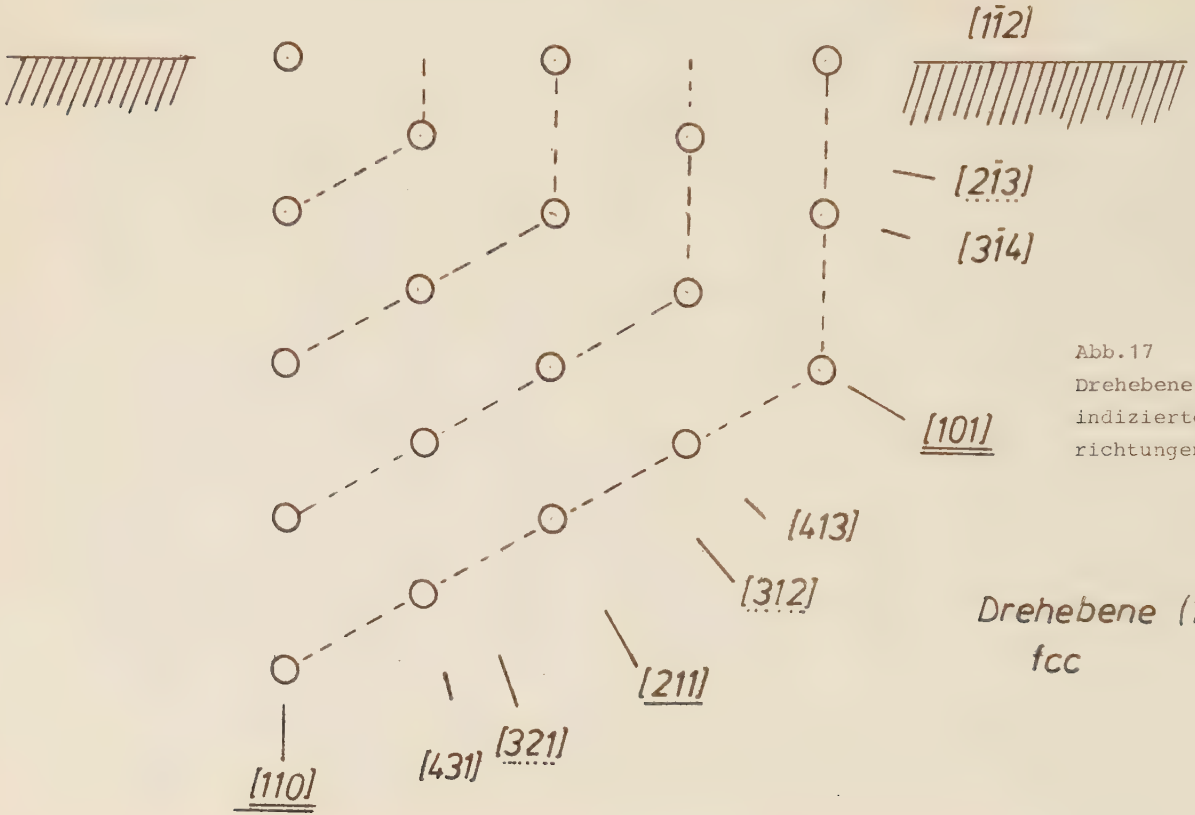


Abb.17
Drehebene und niedei
indizierte Citter-
richtungen.

Bei streifendem Einfall sieht der Ionenstrahl nur Atome der obersten Atomlage,da die Atome der zweiten Atomlage, die nur ca.0.1nm tiefer liegen,in dieser Richtung gerade verdeckt sind.

Die Anordnung der Atome in der Drehebene ($\bar{1}11$) zeigt Abb.17 Sie hat sechszählige Drehsymmetrie.(60^{o}).Die eingezeichneten Richtungen sind so gekennzeichnet,daß gleichwertige Richtungen gleich unterstrichen sind.Die gestrichelten Linien verbinden Atome,die gegenüber dem Drehpunkt ("Atom" links oben) Richtungen haben,deren größter Index

$$n = \max (h,k,l) \qquad (2.1)$$

gleich ist,wie z.B. 312 und $2\bar{1}3$.Diese Unterscheidung wird für die Abschätzung der Transparenz dieses Atomfeldes für die Ionen,die in bestimmten Richtungen einfallen,wichtig.

Fällt nun der Strahl in eine der bezeichneten Richtungen ein,so bilden die Atome Ketten,deren Abstand je nach Richtung variiert.Kommt ein Ion der Kette zu nah,wobei der kritische Abstand bei größenordnungsmäßig 0,1 A_o (A_o=Gitterabstand) liegt,so wird es stark gestreut,und hat danach eine"zufällige" Richtung.Die nicht gestreuten Ionen können nahezu ungehindert durch die obersten Lagen dringen,und lösen auf ihrem Weg nur wenig Elektronen aus, da die Dichte der Elektronen zwischen den Atomen klein ist. Die ausgelösten Elektronen,die im Festkörper kinetische Energien von ca.15 bis 30eV haben,werden nach mittleren freien Weglängen von 3 bis 0,7nm gestreut (30).Daher sind Unterschiede in der Transparenz nur durch die kristalline Struktur der obersten etwa 1o Atomlagen bedingt.

1) Die Ausbeute η bei Protoneneinfall

Mit $$\eta = \frac{\text{Zahl der Sekundärelektronen}}{\text{Zahl der Ionen}} \qquad (2.2)$$

von 5 keV Protonen auf reinem Ni (110) ist für steile Winkel ϑ =0-60^{o} in Abb.18 dargestellt.

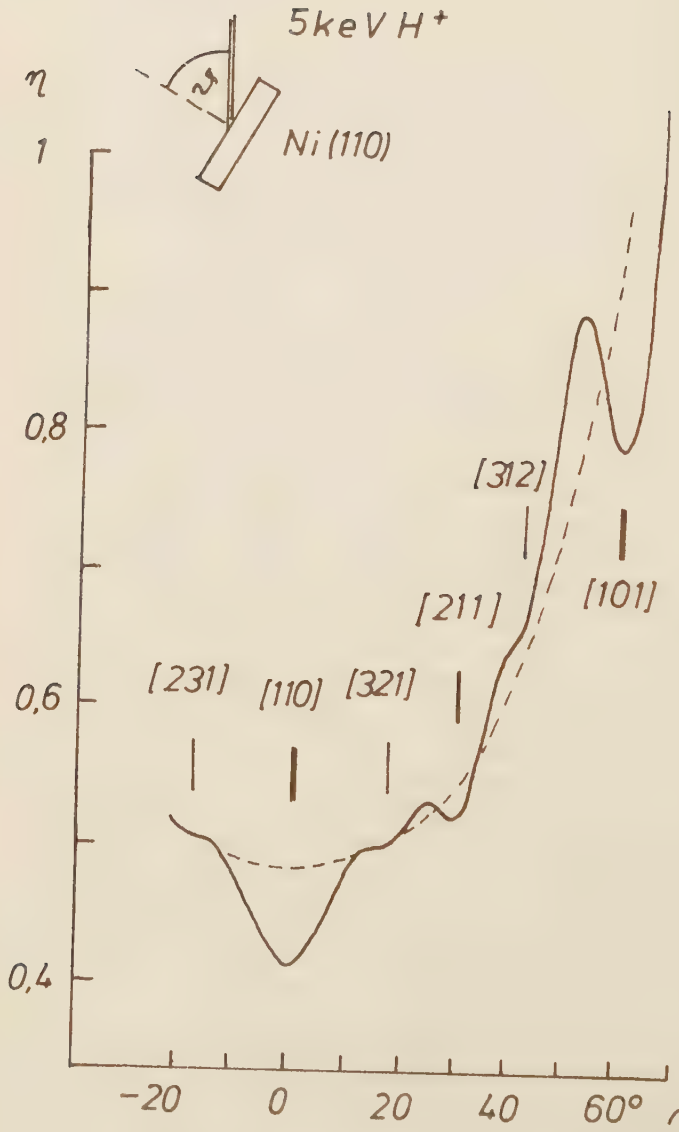


Abb.18 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV Protonen unterschiedlicher Einfallsrichtung —— ; zum Vergleich: $\eta = 0.48 \sec\vartheta$ ----.

Die gestrichelt eingezeichnete Kurve ist proportional zu $\sec\psi$,der Auslösung für nicht einkristallines Material. Die winkelabhängige Ausbeute zeigt gegenüber $\sec\psi = \cos^{-1}\psi$ Schultern neben den transparenten Richtungen und Einsenkungen in diesen Richtungen.Dabei ist die Variation der Ausbeute 20% in [110] -Richtungen bei 0° und 60°,10% in [210]-Richtung bei 30°,und 4% in den am höchsten indizierten [321]-Richtungen bei 19° und 41°.
Die auftretenden Schultern hängen mit der verstärkten Rückstreuung der Teilchen zusammen,wie aus den folgenden Messungen zu ersehen ist.Der Begriff Teilchen wird hier in dem Sinn verwendet,daß die Ionen nach der Rückstreuung unterschiedliche Ladungszustände annehmen können.

Abb.19 zeigt $\eta' = (i_G - i_I)/i_I$ (2.3)

mit i_G Gesamtstrom auf die Probe
i_I Ionenstrom,der auf die Probe einfällt

für 5 keV Protonen,die über den gesamten Winkelbereich von senkrechter bis streifender Inzidenz eingefallen waren.Bei dieser Messung wurde die Probe mit einer gegenüber den Gefäßwänden positiven Spannung von 0 - 20 V, bezeichnet als U , versehen.Der Gesamtstrom auf die Probe setzt sich dann folgendermaßen zusammen:

$$i_G = i_I + i_E + i_R + (i_{H+} + i_{H-}) \qquad (2.4)$$

mit i_E Strom der emittierten Elektronen (Targetausl.)
i_R Strom der rückläufigen Elektronen (Wandauslösung)
i_{H+} ,i_{H-} Strom der emittierten Ionen

Die rückläufigen Elektronen geben einen negativen Strom. Sie werden von an der Probe rückgestreute einfallende Ionen an den die Probe umgebenden Gefäßwänden erzeugt, und mit zunehmender positiver Vorspannung an der Probe gesammelt.
Die Ströme der emittierten Ionen können wegen ihrer Kleinheit ($i_{H+} + i_{H-} \approx 0{,}01\ i_E$) vernachlässigt werden.
Die verbleibenden Ströme der einfallenden Ionen sowie der

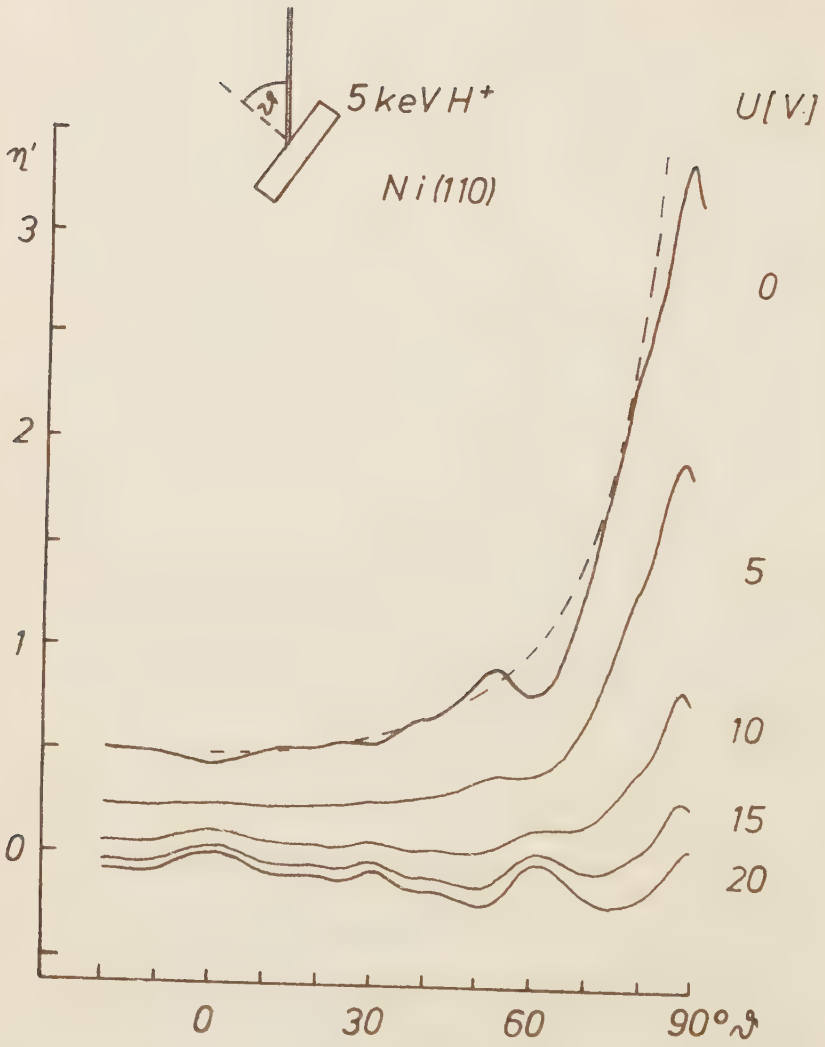


Abb.19 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV Protonen unterschiedlichen Einfallswinkels ϑ bei verschiedenen Verzögerungsspannungen U. Zum Vergleich: η=0.48 sec ϑ ---.

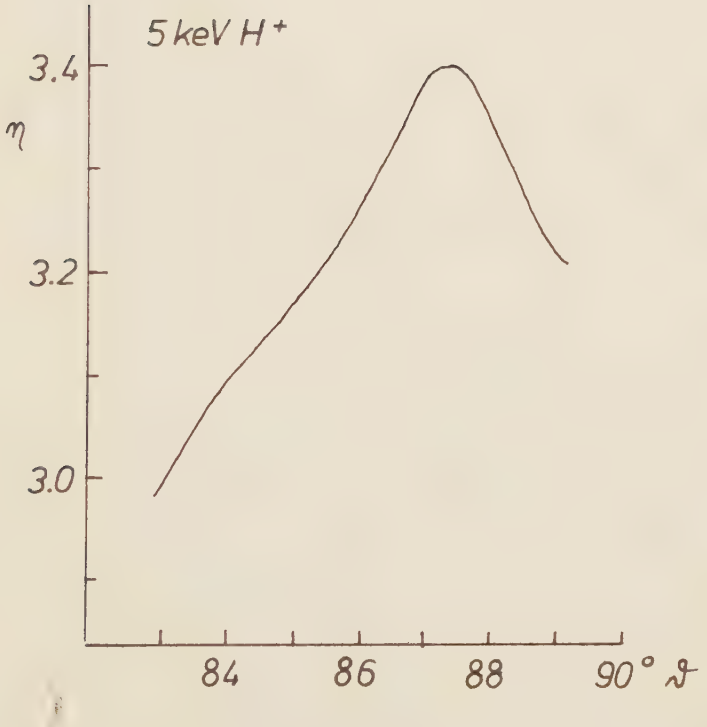


Abb. 20 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV Protonen bei flachen Winkeln.

emittierten Elektronen sind positiv.
Mit (2.3) ist

$$\eta' = (i_E - |i_R|)/i_I \qquad (2.5)$$

Da

$$i_E = e \int_U^\infty n_{el}(E)\, dE \qquad (2.6)$$

mit wachsender Vorspannung U kleiner wird, da nur noch Elektronen mit einer Energie E, die größer als eU ist, den Festkörper verlassen können, und die Zahl der rückläufigen Elektronen mit U ansteigt, fällt η' mit U kontinuierlich bei allen Winkeln .
Aus meßtechnischen Gründen wurden Elektronen, die durch die gegenüber den rückgestreuten Teilchen um eine Größenordnung höhere Zahl der reflektierten Teilchen bei Winkeln $\vartheta > 70^\circ$ an den Gefäßwänden ausgelöst wurden, durch geeignete Absaugspannungen eliminiert.
Da die Energieverteilung der Elektronen bei Ioneninzidenz zwischen 0 und ca 70° annähernd gleich ist, wird das unterschiedliche Absinken der Ausbeuten an den Schultern und Einsenkungen für niederindizierte Richtungen bzw. daneben durch die unterschiedliche Rückstreuung verursacht.
Die Kurven der Abb. 19 ergeben kleinere Rückstreuung für Ioneneinfall in niedrigindizierte Gitterrichtungen.
Die Ausbeutekurve schmiegt sich bei U=0V, abgesehen von den Schwankungen durch die Anisotropie bis zu Einfallswinkeln der Ionen von 75°, an die eingezeichnete $\sec\vartheta$-Vergleichskurve. Dieser Zusammenhang geht bei Übergang zur Oberflächenstreuung für die letzten 15° zunehmend verloren. Für Winkel, die näher als $2{,}5^\circ$ von streifender Richtung entfernt sind, fallen die Ausbeuten sogar. Dies ist bis 1° mit einem in seiner Breite auf 0,1 mm gedünnten Strahl gemessen und in Abb. 20 gezeigt.

Die Ausbeute hat ein Maximum bei einem Winkel von $2{,}5^\circ$ gegenüber streifender Inzidenz der Protonen. Die für jedes 5 keV Proton ($v_p = 0{,}45\ v_o$) im Mittel ausgelöste Elektronenzahl ist 3,4. Dabei ist

$$v_o = e^2/\hbar = c/137 = 2{,}19 \cdot 10^8 \text{ cm/s} \qquad (2.7)$$

die Bohr-Geschwindigkeit des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms.

Der Winkel $\psi = 87{,}5^{\circ}$ ist gleichzeitig der kritische Winkel, an dem die diffuse Reflexion in eine geordnete Reflexion an der Oberfläche übergeht. Dies folgt aus Messungen des Reflexionssignals in Kapitel 3 wie auch der Umladung der Ionen in Kapitel 4.

2) Einfall von Molekülionen.

Die Messungen der von den Einschußwinkeln der Ionen abhängigen Ausbeuten an Sekundärelektronen zeigt Abb. 21-23 Die einfallenden Ionen sind in Abb. 21 u. 22 H_2^+, und in Abb. 23 H_3^+-Ionen.

Da die Ausbeuten auf den Ionenstrom bezogen sind, erhält man die Ausbeute pro Nukleon bzw. Proton entsprechender Energie fur Molekülionen H_n^+ als

$$\eta(E) = (1/n) \cdot \eta(E_{ion}/n) \qquad (2.8)$$

Dabei ist angenommen, daß die Moleküle bereits an der Oberfläche dissoziieren (38) und, nachdem sie ihre Elektronen an den Festkörper abgegeben haben, als von einander unabhängige Fragmente ihren Weg fortsetzen. (39)

Die kleineren Geschwindigkeiten der H_2^+ - und besonders der H_3^+ -Ionen der Energie 5 keV bewirken eine Zunahme der Ausbeute-Anisotropie in niederindizierten Richtungen. Außerdem bleiben die Ausbeute-Kurven bei flacheren Einschußwinkeln deutlicher hinter der $\sec\psi$ -Abhängigkeit zurück. Dies läßt sich mit Rechnungen von Oen et al. (40) auf die bei kleineren Geschwindigkeiten vergrößerte Wahrscheinlichkeit der Rückstreuung im Bereich der obersten Atomlagen, wie auch der schon bei kleineren Winkeln einsetzenden Reflexion der Teilchen erklären.

Dies führt zu einer stärkeren Differenzierung für die Auslösung in niederindizierten Richtungen.

Das Maximum der Ausbeute liegt für 5 keV H_2^+ bei 2.5 Elektronen pro H_2^+ Ion für $\vartheta = 86^{\circ}$ ($\hat{=} 4^{\circ}$ von streifender Inzidenz);

Abb.21 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV H_2^+-Ionen unterschiedlichen Einfallswinkels ϑ bei verschiedenen Verzögerungsspannungen U. Zum Vergleich: $0{,}48/\cos\vartheta$ - - -.

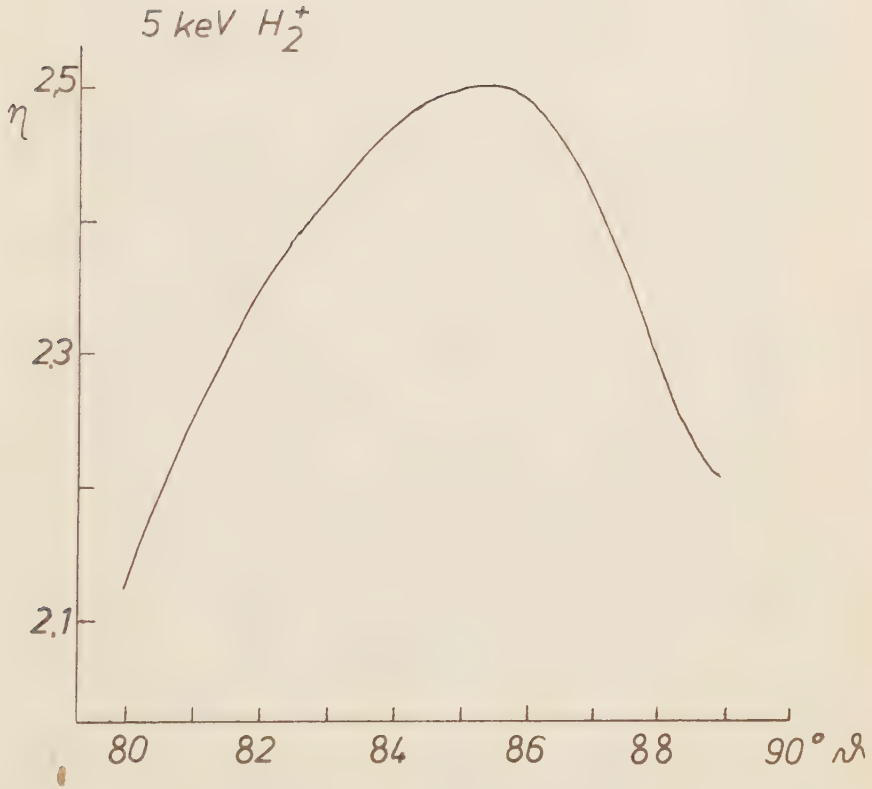


Abb. 22 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV H_2^+ Ionen bei flachen Winkeln.

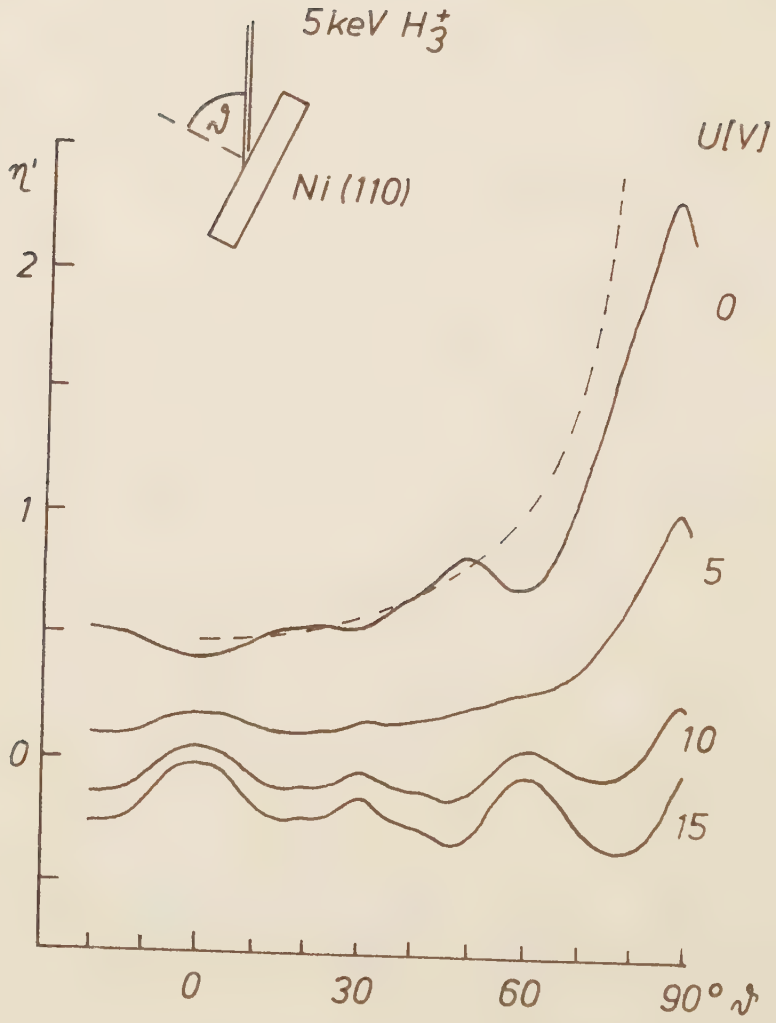


Abb.23 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV H_3^+-Ionen unterschiedlichen Einfallswinkels φ bei verschiedenen Verzögerungsspannungen U. Zum Vergleich: $0{,}49/\cos\varphi$ - - -.

im Falle von H_3^+ bei 2,2 Elektronen pro H_3^+ Ion.

Die Ausbeuten, bezogen auf die Energie pro Nukleon sind in Abb. 24 für drei Einfallswinkel der Ionen dargestellt:
für a streifenden Einfall
b =23°; neben 110-Richtung (Schulter)
c in 110-Richtung; senkrecht.
Bemerkenswert ist, daß η bei streifendem Einfall der Ionen keine lineare Funktion der Geschwindigkeit ist.

3) Vergleich mit einem Halbleiter

Abb. 25 zeigt die Sekundärelektronen-Ausbeute mit dem Einfallswinkel der 5 keV H_2^+ -Ionen an Si(111) im Vergleich zu Ni(110). Der Si -Einkristall hatte die Reinigung durch Kathodenzerstäubung mit dem streifenden H_2^+ -Strahl, anders als das Nickel nicht unbeschadet überstanden, was sich nach Wegnahme einer mehratomigen SiO_2 Schicht als Fehlen der durch die obersten Atomlagen verursachten Anisotropie bei einkristalliner Beschaffenheit zeigte.
Trotzdem zeigt der Vergleich Interessantes:
Während bei Ni die Ausbeute bei flachen Strahlwinkeln durch die Auslösung freier Elektronen im "dünnen" Elektronenausläufer der Oberfläche verringert ist, folgt die Ausbeutekurve bei Silizium exakt einer sec ψ Abhängigkeit bis $\psi = 80°$. Dies deutet auf unterschiedliche Auslösung von freien und im Kristall ortsfesten Elektronen hin.

4) Einfluß einer Bedeckung durch Kohlenstoff auf die Ausbeute.

Reines und bedecktes Material haben sehr verschiedene Ausbeuten an Elektronen bei Ionenbeschuß. Abb. 26 zeigt die winkelabhängigen Ausbeutekurven für 5 keV Protonen an Ni(110) Oberflächen mit unterschiedlichen Kohlenstoff-bedeckungen: Einmal ist $\Theta_C = 0{,}01$ Monolagen (ML), zum anderen ist $\Theta_C = 1$ ML.
Es läßt sich feststellen, daß die Bedeckung die Anisotropie der Auslösung vermindert. Eine Monolage C verschleiert die Struktur der Oberfläche in Bezug auf die

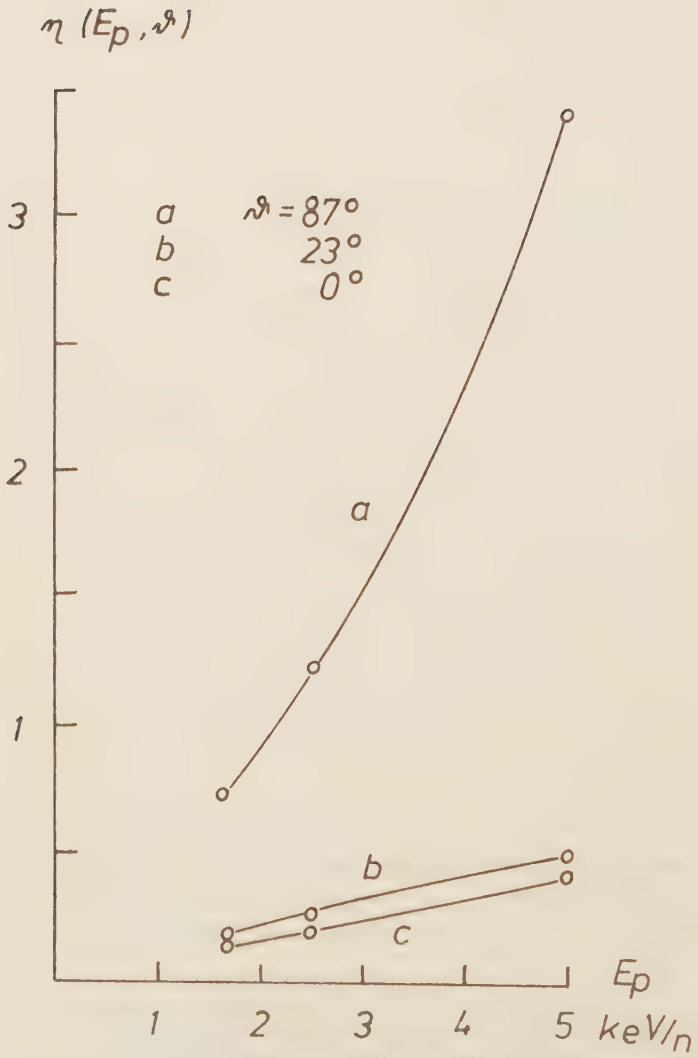


Abb. 24 Sekundärelektronen-Ausbeute bei verschiedenen Ionenenergien E_p und Einfallswinkeln ϑ

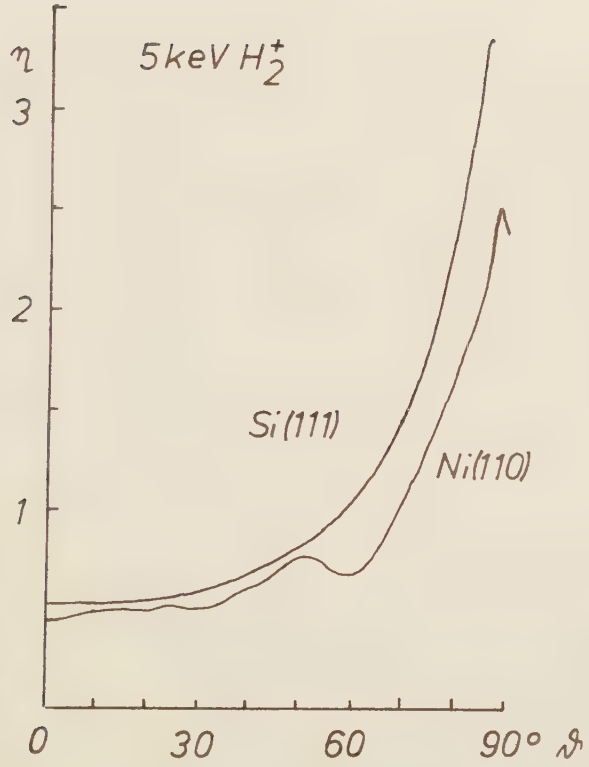


Abb.25 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV H_2^+ Ionen unterschiedlicher Einfallsrichtungen ϑ bei Ni(110) und Si(111).

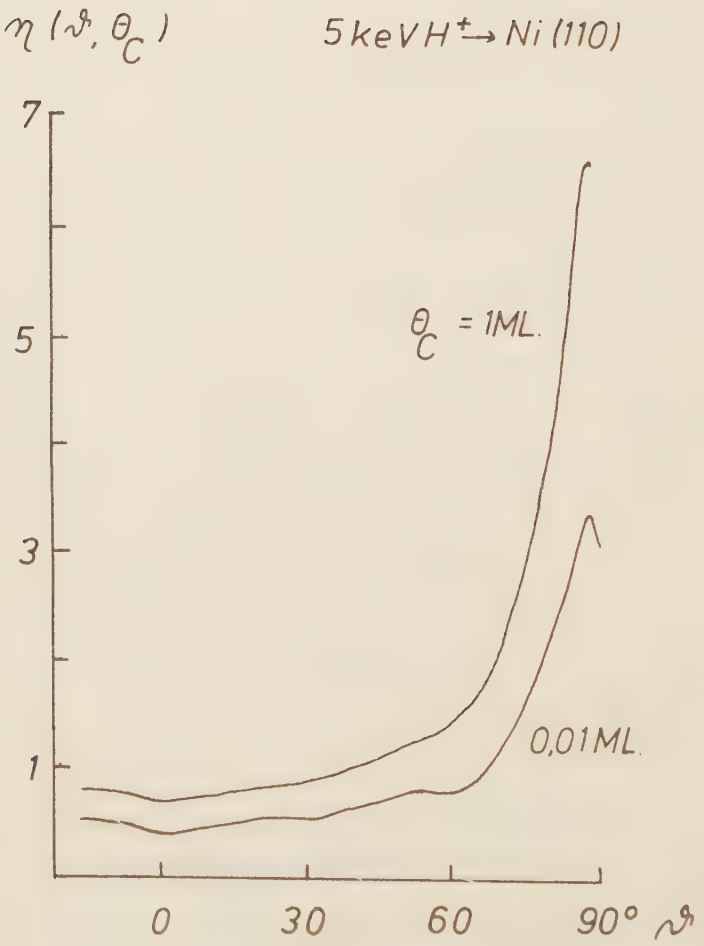


Abb.25 Sekundärelektronen-Ausbeute durch 5 keV Protonen unterschiedlicher Einfallswinkel bei mit Kohlenstoff bedeckter und reiner Ni(110)-Oberfläche.

Elektronenauslösung fast ganz,für senkrechten Einfall der Protonen ist noch eine Struktur erkennbar.
Die Ausbeute selbst hat sich durch die Bedeckung in etwa verdoppelt,sie folgt,ganz wie bei reinem Si einer $\sec\varphi$ Abhängigkeit,was auch hier als Auslösung vorwiegend ortsgebundener Elektronen verstanden werden kann.

(2.I.B) Theoretische Vorstellungen zur Auslösung von Sekundärelektronen durch Ionen

1) Vorhandene Theorien :

a) Kinetische Emission.

Sternglass (41) ,Parilis u.Kishinevsky (42) haben die Auslösung von Elektronen im Festkörper durch schnelle Ionen oder Atome unter dem Gesichtspunkt beschrieben,daß ein Teil des elektronischen Energieverlustes der Teilchen zur Emission von Elektronen verwendet wird.Auf Grund der höheren Energie der Ionen ($v_p > v_o$) haben sie die Anregung gebundener Elektronen durch nahe Stöße betrachtet.Sie kommen zu dem Ergebnis, daß die Ausbeute auf dem Weg C der Teilchen

$$\eta = (T/2\bar{E}) \int_C S(v_p)\, k(v_p,x) \exp(-x/L)\, dx \qquad (2.9)$$

mit $S(v_p)=(dE/dx)$ Elektronischer Energieverlust der Teilchen im Festkörper

$\bar{E}$ mittlere Anregungsenergie der Elektronen

$k(v_p,x)$ Wahrscheinlichkeit f.δ-Strahlenanregung

T Transmissionskoeffizient d.Oberfläche

L mittlere freie Weglänge der Elektronen

ist.Der Faktor 1/2 rührt von der Gleichverteilung des Energieverlustes auf nahe und ferne Stöße nach Bohr(43)her. Diese Beziehung haben Baragiola et al.(44) auch für kleine Geschwindigkeiten ($v_p < v_o$) umgedeutet.Sie bekommen mit der plausiblen Annahme,daß die Teilchen auf

dem Weg,der der mittleren freien Weglänge der angeregten Elektronen im Festkörper von $L \approx 3$ nm entspricht,vernachlässigbar wenig Geschwindigkeit verlieren,eine Ausbeute von

$$\eta = TLS(v_p)/\bar{E} \qquad (2.10).$$

Sie haben mit dem Lindhardschen Energieverlust(45) die Ausbeute aus ihren Messungen für $v_p < v_o$ zu

$$\eta = 0{,}01\ S(v_p)\ \text{nm/eV} \qquad (2.11)$$

bestimmt.Ferrell und Ritchie(3) haben in ihrem Übersichtsartikel den Energieverlust allgemeiner berechnet, und geben für Ni mit dem Elektronenradiusparameter $r_s = 1{,}8$ (79)

$$S(v_p) = 100(\text{eV/nm}) \cdot v_p/v_o \qquad (2.12)$$

an.Gln.(2.11,12)ergeben unter Einbeziehung des Ioneneinfallswinkels ϑ

$$\eta = 0{,}45\ \sec\vartheta$$

für 5 keV Protonen,was unter Ausklammerung der Kristallstruktur die Ausbeutekurve der Abb.22 gut wiedergibt.

b)Potentialemission

Shekhter(45),Lamb(45)und Hagstrum(7) haben die Emission eines Augerelektrons beim Auftreffen eines langsamen Ions ($v_p < v_o$) auf die Oberfläche beschrieben.Danach geht,wenn das Ion einen Abstand s von ca.0,2 nm von der Oberfläche erreicht hat,ein Valenzelektron in den Grundzustand des Atoms über.Die freiwerdende Energie regt ein weiteres Elektron an,das den Festkörper verlassen kann.Seine kinetische Energie ist nach oben beschränkt.Sie ist höchstens

$$E_A^{max} = J - 2\Phi$$

mit J Jonisierungsenergie des Atoms
Ø Austrittsarbeit des Festkörpers
Die Ausbeute wurde von Kishinevsky(46) zu

$$\eta_A \doteq (0,2/E_f)(0,8J-2Ø) \; ; \; J \geq 2,5Ø \qquad (2.13)$$

mit E_f als Fermienergie abgeschätzt.Dies ergibt mit $E_f \doteq 9eV$, $Ø \doteq 4,5$ eV für Ni (96),(79)und J=13,6eV für H $\eta_A = 0,05$,also nur etwa 10% der Ausbeute für kinetische Emission.

c)Molekularer Effekt
Die Auslösung der Elektronen ist für H_2^+ -Ionen gegenüber zwei Protonen der halben Energie nach Baragiola(38) je nach Festkörper und Geschwindigkeit erniedrigt. Sie haben Abweichungen für ($v_p < v_o$) bis zu 10% festgestellt.Als Erklärung wird die verminderte Elektronen-Auslösung der nach der Dissozoation noch eine kurze Strecke sich korreliert bewegenden Fragmente gegeben. Erst,wenn der Abstand der Fragmente größer als die Abschirmlänge im Elektronengas wird, dürfen die entstandenen Protonen als unabhängig betrachtet werden. Unter Miteinbeziehung dieses Effektes ergeben sich geringfügige Abänderungen in der Auswertung der Meßergebnisse(2IA;Abb.24).Er wird im folgenden vernachlässigt.

2)Einfluß der Kristallstruktur:
Für niederindizierte Richtungen der einfallenden Ionen ist die Auslösung von Elektronen geringer.(88)
Dies hat zwei hauptsächliche Ursachen:
-Durch das ungehinderte Eindringen der Ionen ist die Rückstreuung im Oberflächenbereich geringer.
-Zwischen den Atomketten ist die Dichte der Elektronen geringer als in der Nähe der Atomrümpfe,der kritische Abstand ist bei H,Ni und 300 K ca.0,1 $Å_o$

3) Transparenzmodell zur Abschätzung der Anisotropie der Sekundärelektronen-Ausbeute.

Nimmt man l_o und L_o als mittlere freie Weglängen für die Produktion der Elektronen durch die Ionen bzw. die Absorption der angeregten Elektronen im Festkörper, so folgt für die Ausbeute im isotropen F.K. (vgl. Abb. 27 c)

$$\eta = k \cdot \int_0^\infty \frac{dx}{l_o} \cdot e^{-\frac{x \cos\vartheta}{L_o}} = k \cdot \frac{L_o}{l_o} \cdot \frac{1}{\cos\vartheta} \qquad (2.14)$$

mit einer Konstanten k, und L_o von ca 1nm.

Im nichtisotropen Fall unterscheide ich

- l_c mittl. freie Weglänge für Elektronenanregung durch Ionen, die innerhalb der ersten Atomlagen auf Atomrümpfe der Ausdehnung A treffen.
- l_v mittl. freie Weglänge für Elektronenanregung durch Ionen zwischen den Atomreihen.

Abb. 17 zeigt, daß der Abstand der Atomketten für die einzelnen niedrigindizierten Richtungen verschieden ist. Er wird um so kleiner, je größer der maximale Richtungsindex

$$n = \max(h,k,l) \qquad (2.1)$$

ist. Abb. 27 a) zeigt die freien und abgeschatteten Zonen für den Fall n=3.

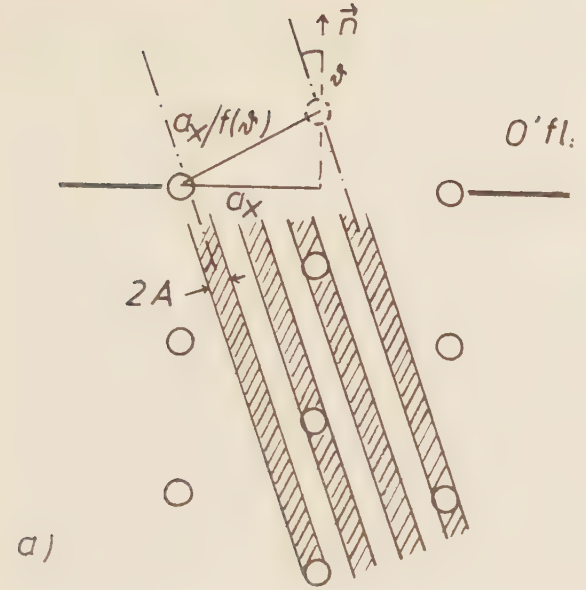
Mit

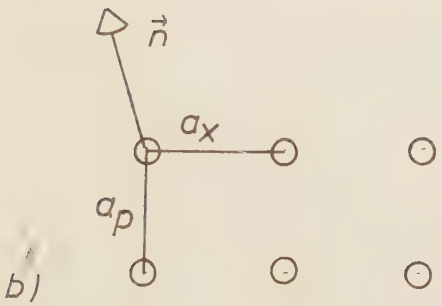
$$f(\vartheta) = \begin{cases} \cos\vartheta & ; \vartheta < 30^\circ \\ \cos(\vartheta - 60^\circ) & ; 30^\circ < \vartheta < 90^\circ \end{cases} \qquad (2.15)$$

folgt für die Breite der offenen Zonen bezogen auf eine Gesamtbreite $a_x/f(\vartheta)$:

$$G(n) = \begin{cases} (a_x/f(\vartheta)) - 2A \cdot n & \text{für } n < a_x/(2A \cdot f(\vartheta)) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad (2.16)$$

Dabei ist a_x der Abstand der $[1\bar{1}0]$ Ketten in der (111)-Ebene.
Mit a_p als Abstand der (111)-Ebenen (Abb. 27 b)
folgt, bezogen auf die Fläche $a_x \cdot a_p$, der Bereich mit





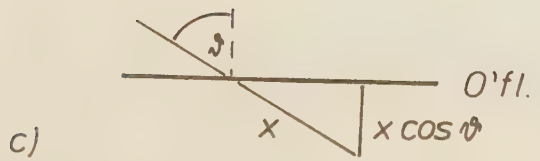


Abb.27

Geometrie Ionenstrahl-Drehebene a) Kettenabstände an der Oberfläche b) Geometrie Ionenstrahl-Oberfläche c)

$$l_o = l_c \quad \text{als} \quad \begin{matrix} B = A^2 \cdot n \cdot f(\vartheta) & \text{für } n < a_x/(2A \cdot f(\vartheta)) \\ E = 2A \cdot a_x & \text{sonst} \end{matrix} \tag{2.17}$$

und

$$l_o = l_v \quad \text{als} \quad \begin{matrix} C = D - B & \text{für } n < a_x/(2A \cdot f(\vartheta)) \\ C' = D - E & \text{sonst} \end{matrix} \tag{2.18}$$

mit $D = a_x \cdot a_p$

Da die Elektronenauslösung der Fläche und der reziproken mittl.freien Weglänge proportional ist, folgt die Anisotropie Y(n) als Verhältnis der Auslösung für niederindizierte Richtung mit maximalem Index n zu zufälliger Richtung.

Die Auslösung in niedrigind.Richtungen ist nach(2.17,2.18):

$$T(n) = B/l_c + (D-B)/l_v \tag{2.19}$$

und für nichtniederigind.Richtungen

$$T' = E/l_c + (D-E)/l_v \tag{2.20}$$

Damit wird die Anisotropie

$$Y(n) = T(n)/T' = \frac{1-(1-l_v/l_c)\cdot B/D}{1-(1-l_v/l_c)\cdot E/D} \tag{2.21}$$

sie überlagert sich der $\sec\vartheta$ Kurve aus (2.14).

Die Messungen Abb. 18, 19 zeigen bei 19^o und 41^o, das sind [321]-Richtungen, noch Anisotropie, während in [431] - Richtungen bei $\vartheta = 16^o$, 44^o und 74^o keine Strukturen mehr aufgelöst sind. Damit ist $3 < n < 4$ und mit (2.16)

$$a_x/8\, f(\vartheta) < A < a_x/6\, f(\vartheta) \tag{2.22}$$

Da $a_x = 0{,}61\ A_o$ mit A_o=Gitterabstand, so liegt der für die Aufstreuung an Atomrümpfen kritische Abstand A zwischen $0{,}08\ A_o$ und $0{,}11\ A_o$.

Mit $\bar{A} = 0{,}1\ A_o$ und $a_p = 0{,}57\ A_o$ sind die Anisotropien aus (2.21) mit $\lambda_\perp = \lambda_v/2$:

$$\begin{aligned} Y(1) &= 0{,}81 && \text{für 110-Richtungen} \\ Y(2) &= 0{,}87 && 211 \\ Y(3) &= 0{,}94 && 321 \\ Y(n>3) &= 1 && \text{andere Richtungen.} \end{aligned} \qquad (2.23)$$

Damit wird die Anderung in den Ausbeuten 1-Y(n):19% für [110] -,13%für [211]- u.6% für [321]- Richtungen.

Die Winkelbreiten der Anisotropien ergeben sich aus dem Abstand der Atomketten für die jeweilige Richtung,und einer für den Effekt bezeichnenden Eindringtiefe t . Sie lassen sich zu

$$\begin{aligned} \Delta\vartheta &= 14^\circ && \text{für 110 -Richtungen,} \\ & 10^\circ && 211 \quad " \\ & 4^\circ && 321 \quad " \end{aligned} \qquad (2.24)$$

mit $t = 1{,}7 A_o$ abschätzen,wobei t aus Abb. 17 und der noch auflösbaren 321 -Richtung folgt.

Diese Abschätzungen lassen sich trotz der groben Näherung eines kritischen Abstands A durchaus mit den Messungen Abb. 18 vergleichen.

Zusammengefasst läßt sich über diesen Teil des Kapitels 2 folgendes aussagen:

-Die Ausbeute steigt generell wie $1/\cos\vartheta$

-Dieser Abhängigkeit sind Schwankungen überlagert,die von der Anisotropie des Einkristalls herrühren.Sie betragen bis zu 20% bei Winkelbreiten bis $\pm$ 7%.

-Der Anisotropieeffekt ist auf den einkristallinen Zustand der obersten 5 Atomlagen empfindlich.

-Fremdatom-Bedeckung verkleinert den Anisotropieeffekt beträchtlich.

-Die für Großwinkelstreuung der 5 keV Protonen in Ni kritischen Atomabstände liegen bei 0,1 A_o.

-Das Verhältnis der mittl.freien Weglängen für die Elektronenanregung durch die Ionen zwischen den Atomen und an den Atomrümpfen ist 1/2,wenn die Messungen durch das Transparenzmodell erklärt werden sollen.

-Bei flacheren Einschußwinkeln verkleinert die zunehmende Reflexion der Ionen die El.-Ausbeute gegenüber der geometrischen $1/\cos\vartheta$ Kurve bei Metallen .Dies tritt bei Si oder mit C -bedecktem Ni nicht auf.

Kapitel 2,Teil 2 (2,II)

Energieverteilung der durch Ionen ausgelösten Elektronen

Die Verteilung der kinetischen Energien der durch Ionen unterschiedlicher Einfallswinkel im Metall ausgelösten und emittierten Elektronen ist als Information näherungsweise schon in den Messungen,die in den Abb- 19 - 23 dargestellt sind,enthalten.

Nur näherungsweise deshalb,weil die Ströme auch der rückläufigen Elektronen (2,I A 1) in den Kurven enthalten sind und ein zu schnelles Absinken der Ausbeuten mit wachsendem Gegenfeld vortäuschen.Zudem ist die Energieverteilung nur in integrierter Form

$$i = e \int_{U}^{\infty} n_{el}(E)\, dE \qquad (2.25)$$

mit n_{el} Zahl der Elektronen
U Gegenspannung

enthalten;es können nur Elektronen höherer kinetischer Energie als eU die Probe verlassen.

Daher wurde die Energieverteilung noch einmal gesondert bestimmt.Dazu wurde der Untergrund von rückläufigen Elek- - tronen durch eine Differenzmessung eliminiert (Kap.1,IIB), und das Stromsignal (2.25) bequemlichkeitshalber nach der Energie der Elektronen differenziert,was direkt die Anzahl der Elektronen einer bestimmten Energie $n_{el}(E_{el})$ im Intervall 0,1 eV liefert.

Die Ergebnisse zeigen,daß die Energieverteilungen,die je nach Auslösung verschieden sind,einem Funktionstyp zugeordnet werden können. Sie haben ein Maximum bei kleinen Elektronen-Energien und fallen für größere Energien etwa exponentiell ab.

Als Maximalenergien der Elektronen E_{el}^{max} wird der Wert angegeben,bei der die Intensität auf 0,02 ihres größten Wertes abgesunken ist.

Die Verteilungen sind in den folgenden Abbildungen auf 1 bei ihrem Maximum normiert, ihre absoluten Werte werden, wo nötig, angegeben.

Die Messungen

1) Energieverteilungen der Elektronen bei unterschiedlichem Einfallswinkel der Protonen

Abb. 28 zeigt die Energieverteilung der durch 5 keV H+ dreier Einfallswinkel im gesamten Raumwinkel ausgelösten Elektronen.

Für nicht streifenden Einfall der Ionen ($\vartheta \approx 0^{\circ}-60^{\circ}$) sind die normierten Verteilungen nahezu gleich, die Intensitäten sind bei $\vartheta = 60^{\circ}$ gegenüber senkrechter Inzidenz verdoppelt. Sie unterscheiden sich gegenüber streifender Ionen-Inzidenz sowohl durch die sechs bzw. drei mal kleinere Intensität, als auch durch die kleinere Maximalenergie der emittierten Elektronen und die leicht verringerte Energie des Intensitätsmaximums in der Nähe von 2,5 eV.

Die unterschiedliche Auslösung kommt daher, daß bei streifender Inzidenz der Ionen kein Eindringen in den Festkörper mehr angenommen werden kann, und die reflektierten Teilchen, die nur ca. 3% ihrer Energie verloren haben (Kap. 3), Elektronen in ihrer Flugrichtung, der "Vorwärtsrichtung auslösen können. Die Elektronenauslösung geschieht hauptsächlich in Vorwärtsrichtung, wie im dritten Teil des Kapitels gezeigt wird.

2) Energie der Protonen

Die Energieverteilungen der durch streifend einfallende Protonen unterschiedlicher Energie ausgelösten Elektronen ist für der Übersichtlichkeit der Zeichnung halber nur zwei Protonenenergien, 1 und 5 keV in Abb. 29 dargestellt. Zwischenwerte der Protonenenergie geben ähnliche Verteilungen, die zwischen den abgebildeten Kurven verlaufen.

Die Verteilungen haben ein breites Maximum bei Elektronenenergien von ca. 0,5 bis 2,7 eV. Da ja bei gleicher Geschwindigkeit von Elektronen und Protonen gilt:

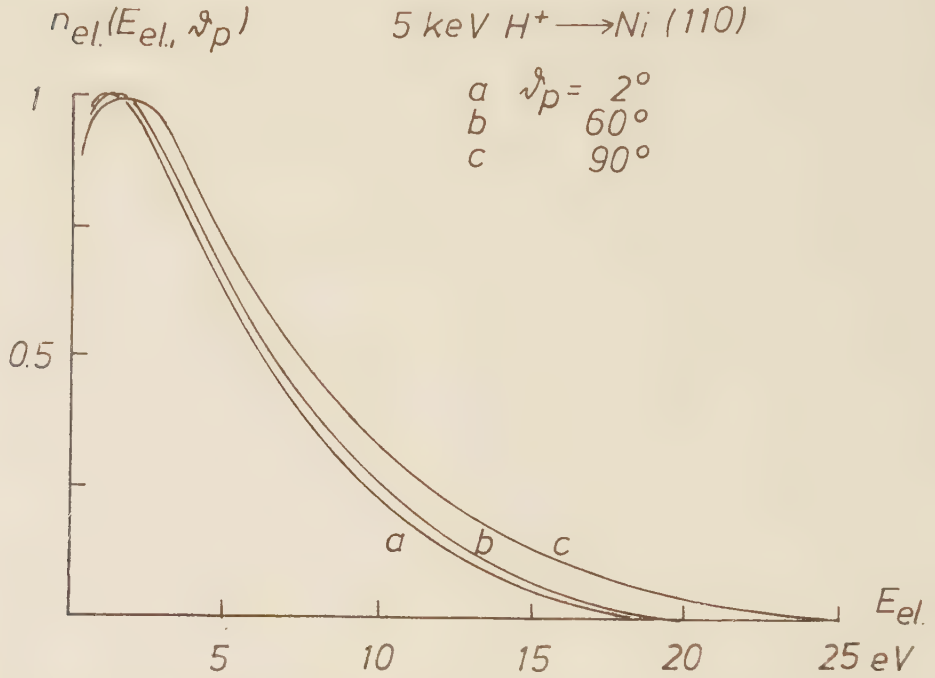


Abb. 28 Elektronen-Energieverteilung bei Auslösung von 5 keV Protonen unterschiedlicher Einfallswinkel.

$$E_e = (m/M) \cdot E_p \qquad (2.26)$$

mit m,M als Massen von Elektron u.Proton.
So entspricht ein Elektron von 2,7 eV einen Proton von 5 keV in der Geschwindigkeit.Das Gros der Elektronen hat also nahezu die gleiche Geschwindigkeit wie die Protonen.

Die Maximalenergien sind auch für die Zwischenwerte der Protonenenergien in Abb.30 aufgetragen.Ein leichter Unterschied zwischen H_2^+-Molekülionen und zwei Protonen der halben Energie ist zu verzeichnen,bleibt aber noch innerhalb der Meßunsicherheit.Die Energie der schnellsten Elektronen ist der Geschwindigkeit der einfallenden Protonen proportional:

$$E_{el}^{max} = 2,04 \cdot E_o (v_p/v_o) \qquad (2.27)$$

mit

$$E_o = e^4 m/\hbar^2 = 27,2 \text{ eV}$$
$$v_o = e^2/\hbar = 2,19 \cdot 10^8 \text{cm/s}$$

Die Maximalenergien sind wegen der ähnlichen Kurvenform auch ein Maß für die durchschnittlichen Energien,die mit

$$\bar{E}_{el} = 0,4 \; E_{el}^{max} \qquad (2.28)$$

abgeschätzt werden können.

In den in (2.27) angegebenen atomaren Einheiten ergibt (2.27)u.(2.28)

$$\bar{E}_{el} = 0,8 \, (v_p/v_o) \cdot E_o \qquad (2.29)$$

wobei v_p sich aus der Protonenenergie in atomaren Einheiten zu

$$v_p = v_o (E_p/25 \text{ keV})^{1/2}$$

bestimmen lässt.Die absoluten Intensitäten wachsen wie E_p.

3)Metall-Halbleiter:
Den Vergleich der Energieverteilung der durch streifenden H_2+ -Ioneneinfall an Si(111) und Ni(110) ausgelösten Elektronen zeigt Abb.31 .

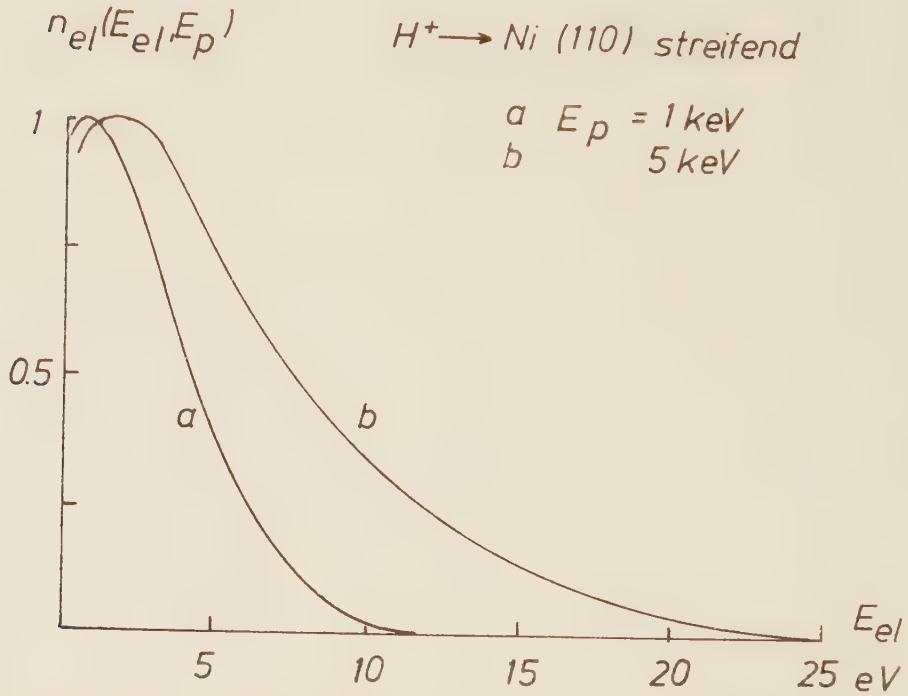


Abb.29 Elektronen-Energieverteilung bei streifender Auslösung von 1 und 5 keV Protonen.

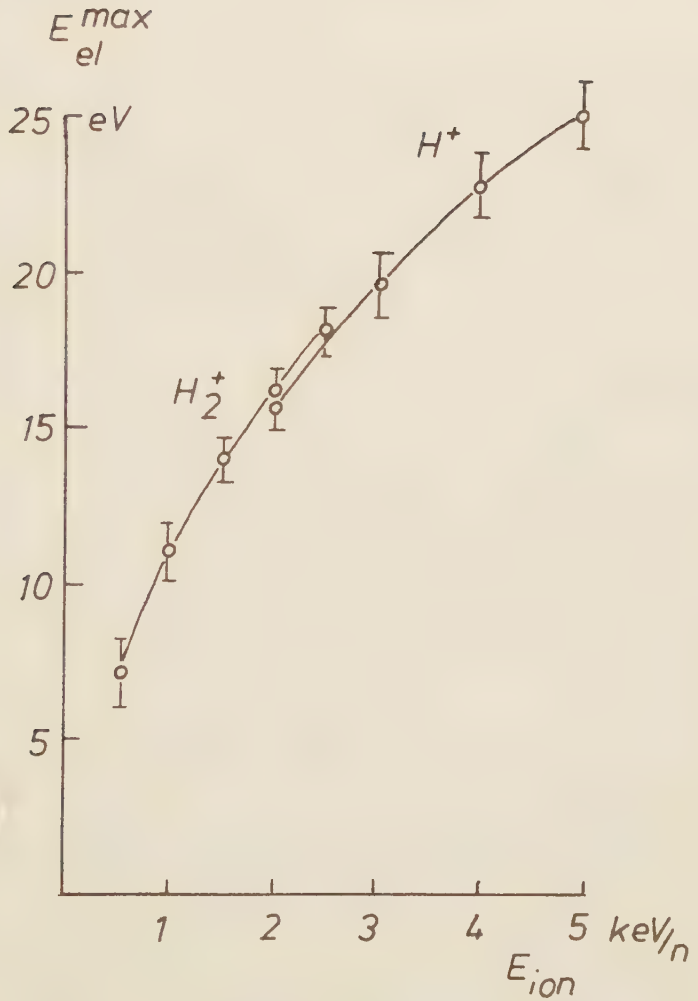


Abb.30 Maximalenergien von durch Ionen unterschiedlicher Energien ausgelösten Elektronen.

Es zeigt sich eine deutliche Verschiebung sowohl des Intensitätsmaximums als auch der Maximalenergie in Richtung kleinerer Energien,die mittlere Energie der emittierten Elektronen ist bei Si etwa 4 eV kleiner als bei Ni.

4)Einfluß der Bedeckung:
Die Wirkung einer Kohlenstoffbedeckung von Θ_C=1ML gegenüber einer reinen Oberläche zeigt für 5 keV Protonen streifenden Einfalls Abb.32 .Es ist das Intensitätsmaximum stark,die Maximalenergie leicht gegenüber der Verteilung für das reine Metall in Richtung kleinerer Energien verschoben,die absolute Intensität ist etwa verdoppelt. (Dabei ist 1ML eine Monolage.)

B) Interpretation der Energieverteilung der Sekundärelektronen.
Über die Energieverteilung der ioneninduzierten Elektronen gibt es vergleichsweise wenig quantitative Theorien.V.Roos(48) hat die Auslösung von Elektronen durch Alkaliionen an Mo beschrieben,und die Energieverteilung der Elektronen aus der Aufstreuung der Alkaliionen und ihrer Wechselwirkung mit der Atomem des Festkörpers erklärt.Die Verteilungen sind den hier gemessenen ähnlich,wenn auch das Erklärungsmodell nicht zutrifft.

Ähnliche Verteilungskurven findet auch Wehner(49)mit He auf Mo,sowie Colombie et al.(50) mit Ar auf verschiedenen Materialien.
Hagstrum(7) hat in einer Theorie über Augerelektronen, die durch Edelgasionen ausgelöst werden,Energieverteilungen abgeleitet,die um ein Maximum E_m etwa gaußverteilt nach höheren Energien sind.Die Varianz der Gaußkurven enthält die Geschwindigkeit der auslösenden Teilchen und ist $h \cdot k_s \cdot v_p$,wobei $k_s = \sqrt{3}\, w_p / v_f$ der Thomas-Fermi-Abschirm-Wellenvektor ist.Diese Verteilungen haben,abgesehen von ihrer verschiedenen Form eine nach (2.I.B b))um eine Größenordnung zu kleine Intensität. (k_s,w_p siehe(2.44)).

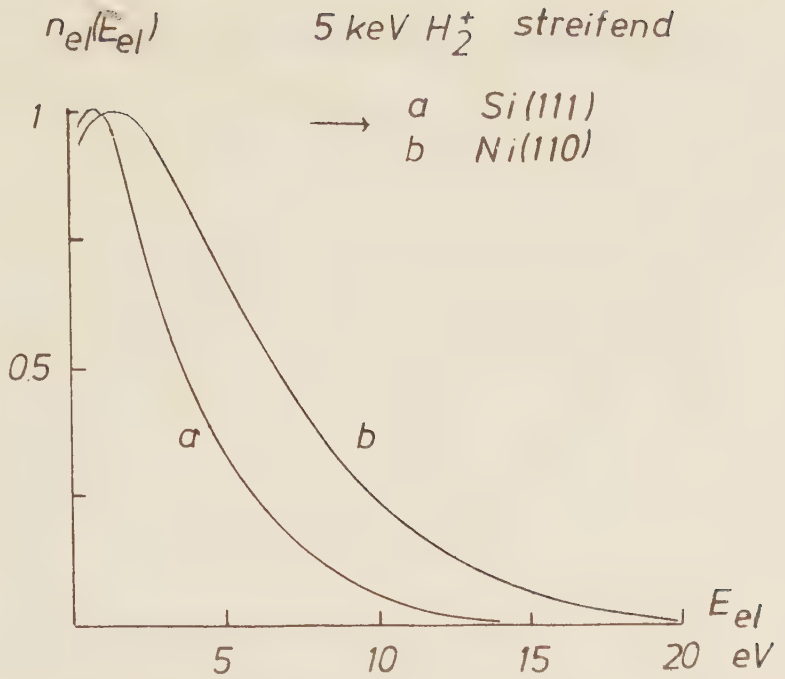


Abb.31 Elektronen-Energieverteilung bei Auslösung durch 5 keV H_2^+ Ionen an Si(111) a) und Ni(110) b).

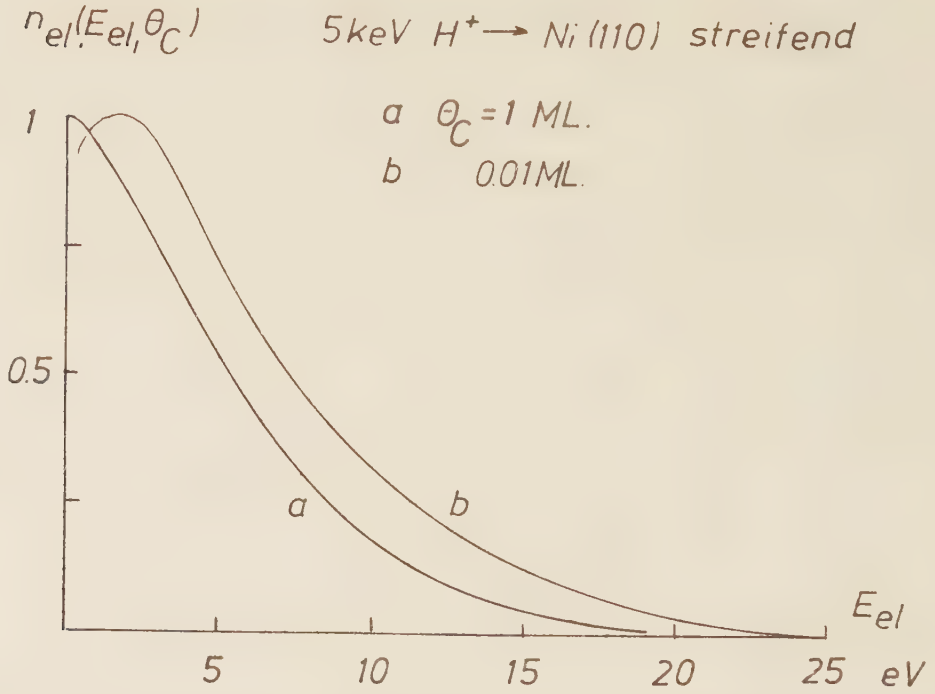


Abb.32 Elektronen-Energieverteilung bei Auslösung streifender 5 keV Protonen an reinem, und mit Kohlenstoff bedecktem Ni(110)

Die hier gemessenen Energieverteilungen lassen sich für den Fall streifender Inzidenz der Protonen qualitativ aus dem in Kapitel 2 Teil 3 folgenden Stoßmodell ableiten,wo als ein wichtiger Anregungsprozess der Elektronen der Stoß eines schnellen Leitungselektrons mit einem Proton betrachtet wird.

Kapitel 2, Teil 3 (2.III.)

Die Richtungsverteilung der emittierten Elektronen und ihre richtungsabhängige Energieverteilung

Die Richtungsverteilung der Sekundärelektronen wurde durch einen beweglichen,abgeschirmten Elektronenauffänger (Cup) gemessen.Er konnte in der Reflexionsebene der Ionenstrahls $(1\bar{1}1)$ auf einer Kreisbahn mit Mittelpunkt auf der Probenmitte bewegt werden,und erfasst einen Raumwinkel Ω_c von 10 msterad bei einer Winkelbreite $\Delta\alpha$ von 2^o in Bewegungsrichtung und $\pm 9^o$ senkrecht dazu.Der Emissionswinkel der Elektronen gegenüber der $[2\bar{1}1]$-Richtung der Oberfläche (Schnittlinie Reflexionsrichtung d.Strahls und O'fl.) wurde mit α_{el} bezeichnet. Die Energieverteilung wurde durch eine im Cup angelegte Gegenspannung gemessen.

Abb. 33 zeigt die Gesamtzahl der in Ω_c bei α_{el} emittierten Elektronen für streifend einfallende Protonen von 5 keV. Die Intensität ist in relativen Einheiten aufgetragen, in absoluten Einheiten entspricht 1 der relativen Skala 0,08 Elektronen/Proton im Raumwinkel Ω_c.

Die Elektronen werden bevorzugt in der Richtung der reflektierten Ionen,also steifend emittiert,während die Intensität für senkrechte Emission zur Oberfläche stark zurückgeht.

Die Hälfte aller gemessenen emittierten Elektronen liegt innerhalb $\alpha_{el}=0^o-30^o$,was ich als "Vorwärtsrichtung" bezeichne.

Für H_2^+ -Ionen gleicher Energie ist die Winkelverteilung der emittierten Elektronen nahezu gleich der für einfallende Protonen;sie ist nicht eigens abgebildet.Die absolute Intensität ist 0,03 El/nukleon bei Ω_c.

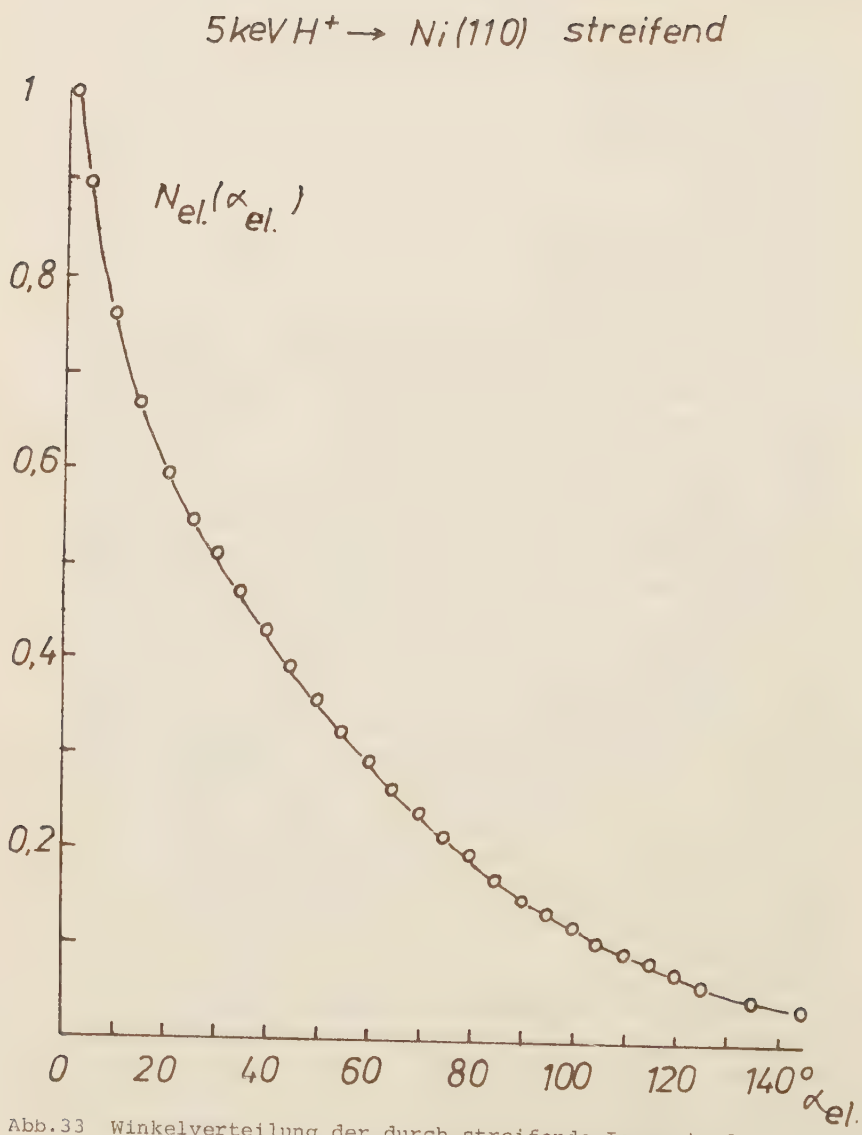


Abb.33 Winkelverteilung der durch streifende Ionen in der Reflexionsebene ausgelösten Elektronen; α_{el}=0 bei streifender Emission.

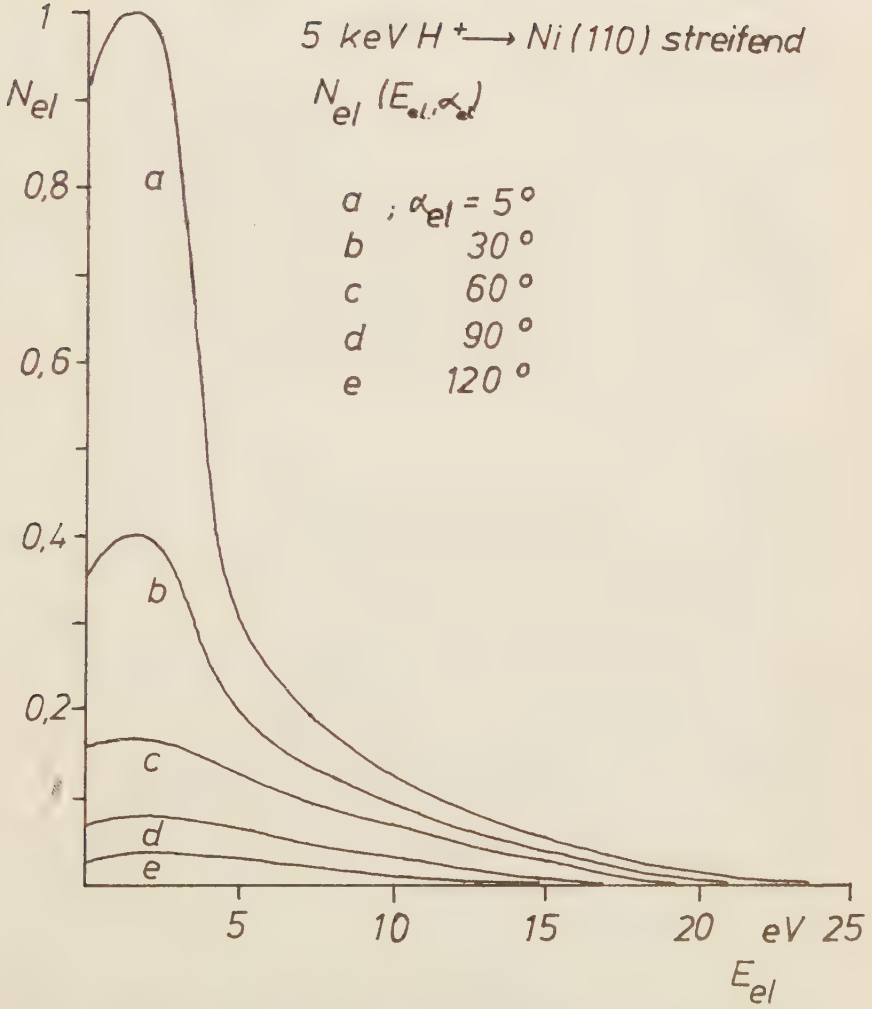


Abb.34 Energieverteilung der durch streifende Protonen in verschiedene Richtungen ausgelösten Elektronen

Energieverteilung bei verschiedenen Winkeln der Emission:

Abb. 34 zeigt die Energieverteilungen der Elektronen für die Emissionsrichtungen $\alpha_{el} = 5^{o}, 30^{o}, 60^{o}, 90^{o}$ und 120^{o}. Die Intensitäten sind auf 1 normiert für $\alpha_{el}=5^{o}$, und untereinander absolut.

Die Verteilungen für die in größere Winkel von der Oberfläche emittierten Elektronen (um die Senkrechte) zeigen mit wachsendem Winkel α_{el} eine zunehmende Gleichverteilung der Energien, während die Verteilungen um die Vorwärtsrichtung starke Intensitäten bei niedrigen Elektronenenergien und eine leichte Vergrößerung der Maximalenergien der Elektronen zeigen.

Die Geschwindigkeit der Elektronen im Intensitätsmaximum ist gleich der Geschwindigkeit der auslösenden Protonen. Die Emissionsricheung der Elektronen mit der größten kin. Energie liegt bei etwa $\alpha_{el}=10^{o}-15^{o}$.

STOSSMODELL

A) Ableitung der Energieverteilung von Elektronen bestimmter Emissionswinkel, die durch Stöße schneller Leitungselektronen mit Protonen an der Oberfläche ausgelöst werden.

Dem nun folgenden Ansatz liegt als Vorstellung der Stoß eines Elektrons der kinetischen Energie ε mit einem an der Oberfläche des Festkörpers streifend entlangfliegenden, langsamen ($v_p < v_f$) Proton zugrunde. Der Stoß wird als Streuung des quasi "freien" Elektrons am abgeschirmten Coulombpotential des Protons aufgefasst, das Festkörperpotential wird als Stufenfunktion angenommen. Die Bahn des Protons wird als klassisch angenommen und der Rückstoß des Protons ist in der Rechnung nicht berücksichtigt.

Einleitend sollen einige Definitionen in den beiden benutzten Systemen, dem Ruhsystem des Protons und dem Ruhsystems des Festkörpers, dem Laborsystem, die als gemeinsame Symmetrieachse die Richtung der Protonengeschwindigkeit längs der Oberfläche haben, angegeben werden:

Ruhsystem des Protons: (2.30)

w Elektronengeschwindigkeit (=Relativg.)

β Streuwinkel des Elektrons in der Ebene $\vec{n}\times\vec{v}_p$, die durch $\vec{v}_p$ und die Senkrechte $\vec{n}$ aufgespannt wird, als Winkel zwischen $\vec{w}$ und der Richtung von $\vec{v}_p$

Θ Streuwinkel des Elektrons

Laborsystem:

$\vec{v}_e$ Elektronengeschwindigkeit vor dem Stoß im Festkörper

$\vec{v}_p$ Protonengeschwindigkeit

δ Winkel zwischen $\vec{v}_e$ und $\vec{v}_p$ vor dem Stoß in der Notation der Abb.35 "Relativwinkel".

φ Winkel zwischen $\vec{v}_e$ und $\vec{n}$ in der Notation der Abb.35

$\vec{n}$ Oberflächennormale $|\vec{n}|=1$

$\vec{u}$ Elektronengeschwindigkeit nach dem Stoß im Festkörper

$\vec{w}'$ Elektronengeschwindigkeit nach dem Stoß außerhalb des Festkörpers (Emissionsgeschwindigkeit)

ϑ Emissionswinkel;

W Potentialstufe

ε $=mv_e^2/2$ kin.Energie d.Elektrons vor dem Stoß im F.K.

ε' $=mw'^2/2$ Emissionsenergie des Elektrons

E_p $=Mv_p^2/2$ kin.Energie des Protons

Einheiten: (2.30a)

m Elektronenmasse

M $\cong 1836\cdot m$ Protonenmasse

α $=(4/9\pi)^{1/3}\cong 0.52$

r_s $=(3/4\pi n a_o^3)^{1/3}$ Elektronenradiusparameter, und

n =Valenzelektronendichte im Festkörper

a_o $=\hbar^2/me^2\cong 0.53\cdot 10^{-8}$cm Bohrradius ; $1/a_o=k_o$

v_o $=e^2/\hbar\cong 2.19\cdot 10^8$cm/s Bohrgeschwindigkeit

E_o $=w_o\hbar=me^4/\hbar^2\cong 27.2$ eV atomare Energieeinheit

v_f $=v_o/\alpha r_s\cong 1.92\ v_o/r_s$ Fermigeschwindigkeit

E_f $=E_o/2(\alpha r_s)^2\cong 1.85\ E_o/r_s^2$ Fermienergie

w_p $=(4\pi ne^2/m)^{1/2}\cong 1.73\ w_o/r_s^{3/2}$ Plasmafrequenz

k_s $=\sqrt{3}\ w_p/v_f=3\alpha\ k_o/r_s^{1/2}\cong 1.56\ k_o/r_s^{1/2}$ Thomas-Fermi-Abschirmwellenvektor

Die Ableitung der auftretenden Geschwindigkeiten und Winkel ist in Abb. 35 verdeutlicht.

Im Ruhsystem des Protons hat das Elektron vor, wie nach dem Stoß, die Relativgeschwindigkeit w mit dem Betrag

$$w = |\vec{v}_p - \vec{v}_e| \qquad (2.31).$$

Mit dem Relativwinkel der beiden Geschwindigkeiten δ in der Notation der Abb. 35 folgt

$$w = \sqrt{v_p^2 + v_e^2 + 2 v_p v_e \cos\delta} \qquad (2.31a).$$

Nach dem Stoß können die Elektronen im Ruhsystem des Protons in beliebige Richtungen reflektiert sein. Die möglichen Geschwindigkeitsvektoren bilden eine Kugeloberfläche mit Radius w um das Proton, deren oberflächenseitige Hälfte in Abb. 35 angedeutet ist.

Beim Übergang zum Laborsystem werden den Elektronen die Protonengeschwindigkeit hinzuaddiert, was anschaulich eine Verschiebung der Kugeloberfläche um $\vec{v}_p$ bedeutet:

$$\vec{u} = \vec{w} + \vec{v}_p \qquad (2.31b).$$

Die Elektronen, die den Festkörper verlassen, müssen noch das anziehende Potential des Festkörpers durchlaufen, und werden von der Normalen weggebrochen, da sie in senkrechter Richtung Geschwindigkeit verlieren. Für die Normalkomponenten der Geschwindigkeiten vor, und nach Durchlaufen der Potentialstufe W, $\vec{u}_n$ bzw. $\vec{w}'_n$ gilt:

$$m u_n^2/2 - m w_n'^2/2 = W \qquad (2.32)$$

Für Elektronen, die in eine Richtung der Ebene $\vec{n} \times \vec{v}_p$ (Reflexionsebene des Protons) gestreut werden, und die im folgenden betrachtet werden, ist:

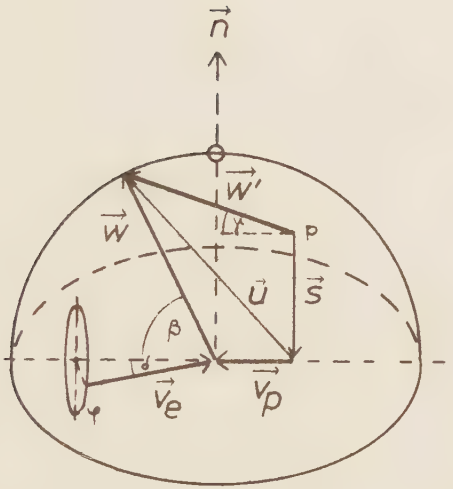


Abb.35 Geschwindigkeiten und Winkel im Stoßmodell.

$$u_n = w \sin\beta \tag{2.33}$$

Aus (2.32,33) folgt:

$$w_n' = \sqrt{w^2 \sin^2\beta - 2W/m} \tag{2.34}$$

Der Geschwindigkeitsverlust $\vec{s}$ der Elektronen durch die Potentialstufe ist in Normalenrichtung mit $\vec{s}=\vec{u}_n-\vec{w}_n'$:

$$\vec{s} = \vec{n}(w \sin\beta - \sqrt{w^2 \sin^2\beta - 2W/m}) \tag{2.35}$$

Die Emissionsgeschwindigkeit der Elektronen ist:

$$\vec{w}' = \vec{w} + \vec{v}_p - \vec{s} \tag{2.36}$$

mit dem Betrag

$$w' = \sqrt{(w \cos\beta + v_p)^2 + w^2 \sin^2\beta - 2W/m} \tag{2.37}$$

und der Emissionsrichtung

$$\gamma = \arctan\left(\sqrt{w^2 \sin^2\beta - 2W/m} \,/\, (w \cos\beta + v_p)\right) \tag{2.38}$$

falls

$$w^2 \sin^2\beta > 2W/m$$

Bei komplexer Wurzel in (2.38) werden die Elektronen an der Potentialstufe totalreflektiert, und können den Festkörper nicht verlassen. Der kritische Winkel, der die Grenze für Totalreflexion angibt ist:

$$\beta_c = \arcsin\left(\sqrt{2W/mw^2}\right) \tag{2.39}$$

Aus (2.37) folgen die Energien der emittierten Elektronen:

$$\varepsilon' = m(w^2 + v_p^2 + 2wv_p \cos\beta)/2 - W \tag{2.40}$$

Dabei hängt β von dem Emissionswinkel ϑ' in der Form der Gl.(2.38) ab.

Falls die Geschwindigkeiten des Elektrons und Protons vor dem Stoß entgegengesetzte Richtungen hatten, folgt aus (2.40) mit dem Relativwinkel $\delta=0$ und $w=v_e+v_p$:

$$\varepsilon' = 2(1+\cos\beta)(\varepsilon_p+\sqrt{\varepsilon_p\cdot\varepsilon}) +\varepsilon-W \qquad (2.41)$$

mit $\varepsilon_p = mE_p/M$; E_p Protonenenergie
ε = kin.Energie des Elektrons im Festkörper

Hat das Elektron vor dem Stoß Fermienergie, so ist (2.41):

$$\varepsilon' = 2(1+\cos\beta)(\varepsilon_p+\sqrt{\varepsilon_p E_f}) -\phi \qquad (2.42)$$

mit $\phi = |E_f-W|$ Austrittsarbeit des Elektrons.

Beim maximalen Energieübertrag $\beta=0$ bewegt sich das Elektron nach dem Stoß in Richtung des Protons längs der Oberfläche mit einer Energie

$$\varepsilon^*_{max}=4(\varepsilon_p+\sqrt{\varepsilon_p E_f}) +E_f \qquad (2.43)$$

und kann, falls es an einem Festkörperatom so gestreut wird, daß es eine ausreichende Geschwindigkeits-Komponente in Richtung der Normalen erhält, mit der größtmöglichen Energie

$$\varepsilon'_{max}=4(\varepsilon_p+\sqrt{\varepsilon_p E_f}) -\phi \qquad (2.43a)$$

den Festkörper verlassen. Diese kinetische Energie ist die obere Grenze der Energien von in diesem Stoßprozess ausgelösten Elektronen.

Abb.36 zeigt die Energie ε' der bei Emissionswinkeln ϑ' in der Reflexionsebene der Protonen ausgelösten Elektronen, die vor dem Stoß Fermigeschwindigkeit hatten, für einige Relativwinkel δ bzw. Relativgeschwindigkeiten $w=(v_p^2+v_e^2+2v_pv_e\cos\delta)^{1/2}$ nach (2.38,40). Dabei ist E_p=5keV, ε_p=0,1a.u., v_p=0,45 a.u.,

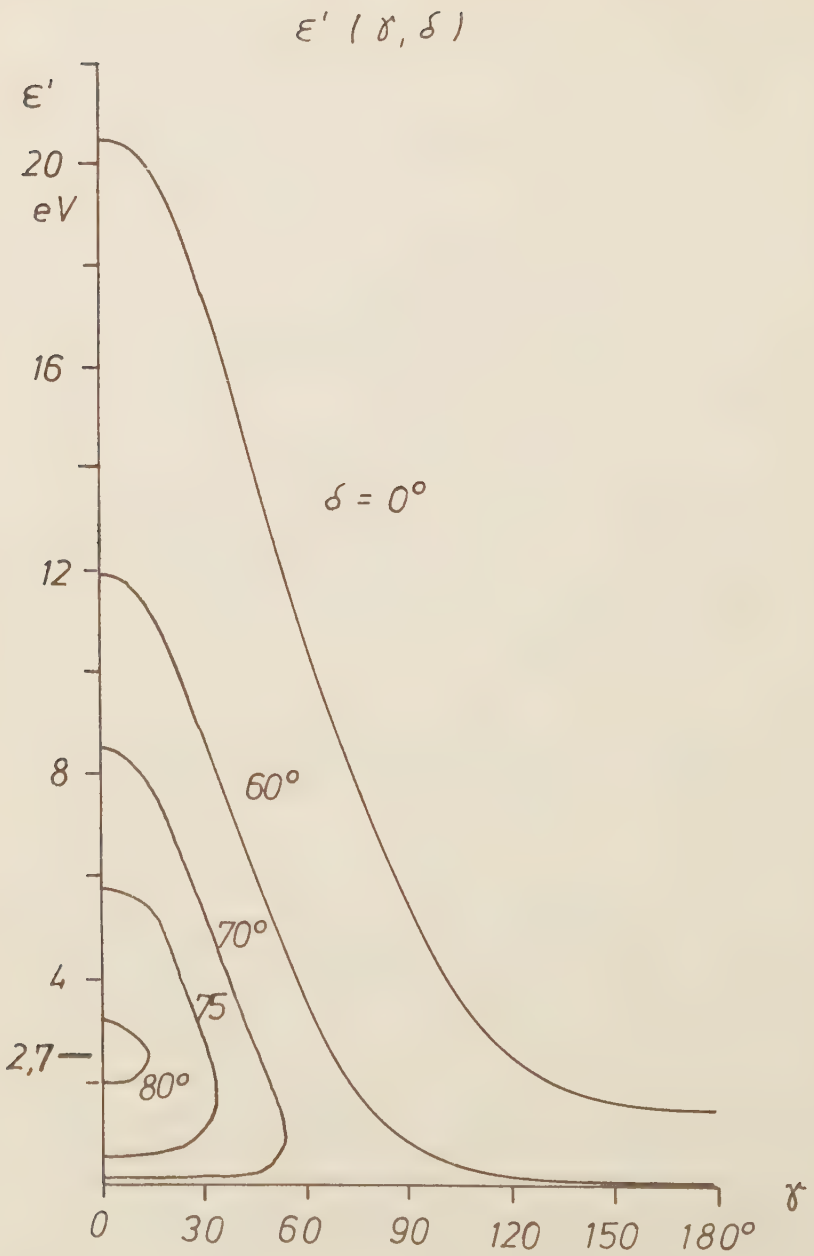


Abb.36 Emissionsenergien bei unterschiedlichen Emissionswinkeln γ für einige Relativwinkel δ bei $\varepsilon = E_f$

E_f=9eV=(1/3)a.u.,und W=13,5eV=(1/2)a.u.gesetzt worden. Die Fermienergie von Ni hat für verschiedene Autoren(79,96, 98)Werte zwischen 8,3 und 9,5 eV,die Austrittsarbeit ist ca.4,5 eV (100).Es wurde daher ein mittlerer Wert für E_f zu 9eV und $W=E_f+\phi$=13,5eV angenommen.

Die Kurven der Abb.36 zeigen mit wachsendem Emissionswinkel γ und Relativwinkel δ abnehmende Energie der emittierten Elektronen.Sie sind bei kleineren Relativgeschwindigkeiten, oder für $\delta > 65^o$, doppeldeutig.Dann befindet sich der Aufpunkt P in Abb.35 außerhalb der Kugeloberfläche:dies erlaubt zwei Emissionsgeschwindigkeiten.

Die Variation der Relativgeschwindigkeit w in der Nähe von $w=|v_p-v_f|$ ist bei Verkleinerung der kinetischen Energie des Elektrons vor dem Stoß stärker als bei Vergrößerung des Relativwinkels δ .Die Kurven für $\delta=0;\varepsilon\cong 0,7E_f$ und $\delta=60^o;\varepsilon=E_f$ entsprechen sich.Die meisten Elektronen,die durch Stöße mit kleinerer Relativgeschwindigkeit als $|v_p-v_f|$ ausgelöst werden, hatten vor dem Stoß Fermigeschwindigkeit,denn:

-Die Stoßwahrscheinlichkeit wächst wie $\sin\delta$.

-Der Streuwinkel Θ (2.47)wird mit wachsendem δ kleiner.

-Die Zustandsdichte ist im Modell des freien Elektronengases bei kleinen Temperaturen(300K) für $\varepsilon < E_f$ im Festkörper $\sim\varepsilon^{1/2}$, und an der Oberfläche näherungsweise $\sim\varepsilon^{3/2}$ nach (64).

Daher wird die kinetische Energie der ausgelösten Elektronen vor dem Stoß mit E_f genähert,die unterschiedlichen Relativgeschwindigkeiten resultieren aus der Veränderung des Relativwinkels δ.

Bei kleiner werdender Relativgeschwindigkeit vor dem Stoß (wachsendem Relativwinkel δ)konzentrieren sich die emittierten Elektronen zunehmend in Richtung der reflektierten Protonen,der "Vorwärtsrichtung",mit Geschwindigkeiten in der Nähe der Protonengeschwindigkeit.Diese Elektronen sind nach Abb.38 im Ruhsystem des Protons (Winkel β)in Richtung der Oberflächennormalen gestreut worden.Beim Durchtritt der Potentialstufe verlieren sie nahezu ihre gesamte Geschwindigkeit in Normalenrichtung.Bei der Transformation ins Laborsystem

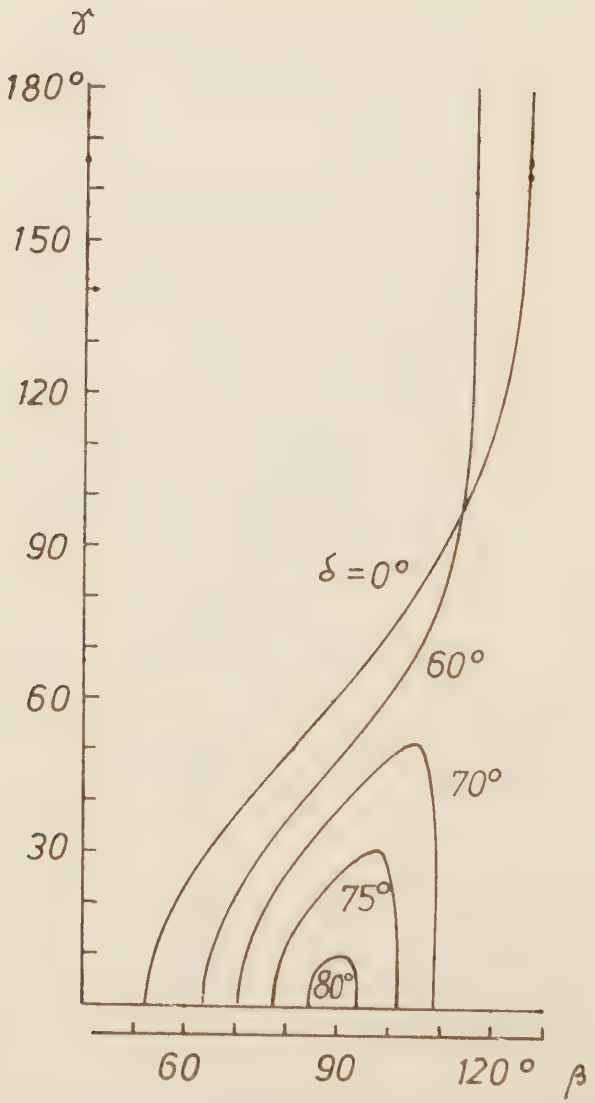


Abb.37 Der Emissionswinkel γ bei unterschiedlichen Streuwinkeln β für einige Relativwinkel δ bei $\varepsilon = \varepsilon_f$

erhalten sie noch die Geschwindigkeit v_p, werden also in Richtung und mit der Geschwindigkeit der Protonen emittiert.

Abb. 37 zeigt die Abhängigkeit des Emissionswinkels γ vom Winkel β der die Richtung der im Ruhsystem des Protons gestreuten Elektronen angibt, für einige Relativwinkel δ, und damit Relativgeschwindigkeiten mit $\varepsilon = E_f$ nach (2.38). Die Emissionswinkel γ sind für kleine Relativgeschwindigkeiten in Vorwärtsrichtung konzentriert, die Streuwinkel β konvergieren gegen 90°, die Richtung der Normalen. Die starke Winkelabhängigkeit resultiert aus der Brechung an der Potentialstufe der Oberfläche.

B) Abschätzung der Intensitäten der in die einzelnen Richtungen emittierten Elektronen:

Bei den in bestimmte Winkel γ emittierten Elektronen handelt es sich bevorzugt um Elektronen, die vor dem Stoß Fermienergie hatten, und die mit kleinem Winkel φ, also vom Inneren des Festkörpers kommend, mit einem Relativwinkel δ auf das Proton trafen. Der Relativwinkel bestimmt die Emissionsenergie, aber auch den Streuwinkel und damit die Streuintensität beim Stoß.

Der Rutherford Streuquerschnitt im Ruhsystem des Protons ergibt für ein Elektron mit Relativgeschwindigkeit w bei einem Streuwinkel Θ am Coulombfeld als Steuintensität pro Raumwinkel:

$$dn/d\Omega \sim 1/(w \sin(\Theta/2))^4 \qquad (2.43)$$

Für ein abgeschirmtes Coulombpotential der Form:

$$V(r) = (e^2/r)\exp(-k_s r) \qquad (2.44)$$

mit $k_s \cong 1.56\, k_o / r_s^{1/2}$

ist der Streuquerschnitt nach Mott(90):

$$dn/d\Omega \sim (4(w^2/v_o^2)\sin^2(\theta/2) + a^2)^{-2} \qquad (2.45)$$

mit $a^2=a_o^2k_s^2=2,44/r_s$ und für Ni(r_s=1,8): $a^2=1,36$ (2.46)

Wegen der starken Streuwinkelabhängigkeit der Streuintensität tragen bei konstantem Relativwinkel δ nur die Richungen mit kleinen Werten von φ (s.Abb.35) $|\varphi|<15^o$ nennenswert bei. Der Streuwinkel θ ist dann im Ruhsystem des Protons:

$$\theta \approx 180^o-(\beta+\chi) \qquad (2.47)$$

mit dem ins Ruhsystem des Protons transformierten Relativwinkel χ:

$$\chi = \text{arc tan } (v_e\sin\delta / v_e\cos\delta + v_p) \qquad (2.48)$$

Die Streuintensität wächst durch das größere Angebot an Elektronen wie $\sin\delta$ bei Zunahme des Relativwinkels δ. Beim Übergang ins Laborsystem muß noch die Verringerung der Intensität um einen geometrischen Term durch die Brechung an der Oberfläche

$$f(\gamma,\beta)=\sin\beta\, d\beta/\sin\gamma\, d\gamma \qquad (2.49)$$

berücksichtigt werden. Er macht den zweiten Ast der doppeldeutigen Energieabhängigkeit von γ (s.Abb.40) mit den niedrigen Energien vernachlässigbar klein, da für diesen Ast $d\beta/d\gamma \approx 0$ (s.Abb.37) ist. Daher läßt sich Die Energie der emittierten Elektronen als eine eindeutige Funktion des Emissionswinkels γ angeben, wenn der Relativwinkel δ gegeben ist.

$$dn/d\Omega \sim \sin\delta \cdot f(\gamma,\beta) \cdot (4(w^2/v_o^2)\sin^2(\Theta/2)+a^2)^{-2} \qquad (2.50)$$

Sie ist eine Funktion des Winkels β, des Emissionswinkels γ, des Relativwinkels δ, der Potentialstufe W und der Geschwindigkeiten des Protons und Elektrons vor dem Stoß.

Für konstantes v_e, v_p und W folgt bei einem bestimmten konstanten Emissionswinkel γ, daß nach (2.38) der Winkel β, die Energie der emittierten Elektronen nach (2.40), der Streuwinkel Θ nach (2.47) und schließlich die Streuintensität $dn/d\Omega$ nach (2.50) nur vom Relativwinkel δ abhängen:

$$\beta = \beta(\delta) \qquad (2.51)$$

$$\varepsilon' = \varepsilon'(\delta) \qquad (2.51a)$$

und somit:

$$dn/d\Omega = dn(\delta)/d\Omega \qquad (2.52)$$

und mit (2.51a): $$dn/d\Omega = dn(\varepsilon')/d\Omega \qquad (2.52a)$$

Abb.38 zeigt Berechnungen von $dn(\varepsilon')/d\Omega$ für Emissionswinkel $\gamma = 10, 30, 60$ und 90°; $v_e = v_f$; $v_p = 0{,}45 v_o$; und $W = 0{,}5\ E_o$

Die Gesamtzahl der in den Winkel γ emittierten Elektronen ist in Abb. aufgetragen, sie beträgt:

$$dn(\gamma)/d\Omega = \int_0^\infty (dn(\gamma,\varepsilon')/d\Omega)\ d\varepsilon' \qquad (2.53)$$

Die Ergebnisse der Abb.38 und 39 lassen sich trotz der Näherungen $\varepsilon = E_f$ und $|\varphi| < 15^\circ$ mit den Messungen (Abb.34 und 33) durchaus vergleichen. Die Messungen der energetischen Verteilung der emittierten Elektronen enthalten für kleine Emissionswinkel α_{el} mehr niederenergetische Elektronen mit Geschwindigkeiten in der Nähe der Protonengeschwindigkeit als die Berechnungen. Dies könnte neben der Näherung, die niederenergetische Elektronen benachteiligt, auch durch nach der Emission zerfallende H^--Ionen und H-Atome bedingt sein. Für größere Emissionswinkel ergibt die Messung mehr

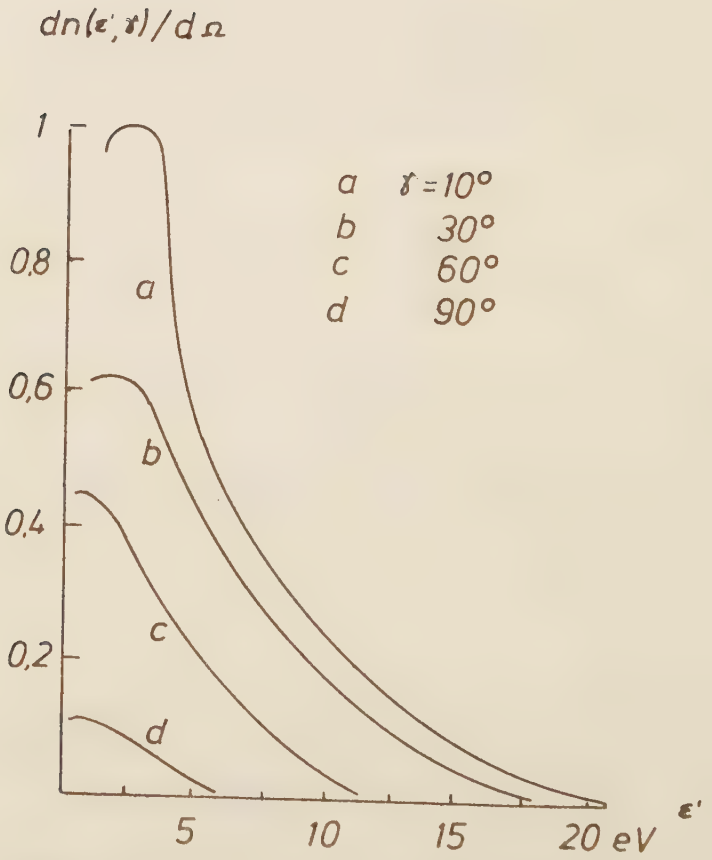


Abb.38 Berechnete Energieverteilungen $dn(\varepsilon',\vartheta)/d\Omega$ der unter einigen Winkeln ϑ emittierten Elektronen.

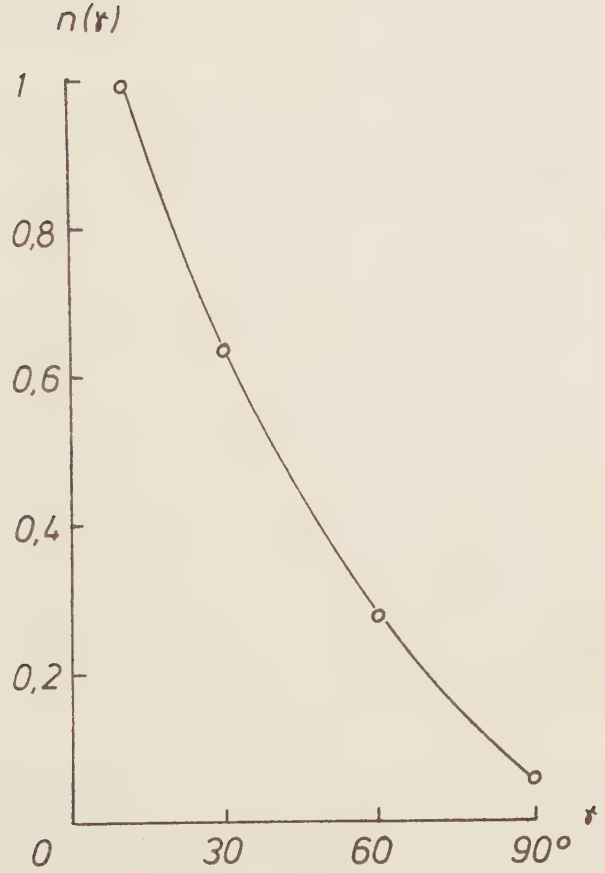


Abb.39 Berechnete Intensitäten n(ϑ) der in unterschiedliche Winkel ϑ emittierten Elektronen.

Elektronen im höherenergetischen Bereich,ab 5 eV, als die Berechnung.Das ließe sich einerseits durch Streuung der Stoßelektronen an Gitteratomen,andererseits als Auslösung durch rückgestreute Ionen erklären.

Die Energieverteilungen für Elektronen,die durch streifende Protonen über den gesamten Raumwinkelbereich über der Oberfläche (Halbkugel) ausgelöst werden,folgt aus (2.50) mit der Intensität für unterschiedliche Emissionswinkel ϑ:

$$dn(\vartheta,\varepsilon')/d\Omega \qquad (2.54)$$

zu

$$n(\varepsilon')=\pi\int_0^{\pi}(dn(\vartheta,\varepsilon')/d\Omega)\ \sin\vartheta d\vartheta \qquad (2.55).$$

Ihre Form entspricht qualitativ den Messungen Abb.28,29.

Die durch senkrechte Inzidenz des Ionenstrahls ausgelösten Elektronen können nach diesem Stoßmodell nicht direkt ausgelöst werden,sie können erklärt werden durch
- Stöße mit rückgestreuten,bzw.stark abgelenkten Teilchen
- Richtungsänderung der in Richtung der einfallenden Ionen ausgelösten Elektronen durch Streuung an einem Steuzentrum im Festkörper.

Anmerkung:
Für Elektronen,die innerhalb des Festkörpers ausgelöst werden,folgt aus dem quantenmechanischen Ergebnis für die Transmission T durch die Potentialstufe W an der Oberfläche, daß die Durchlaßwahrscheinlichkeit für $u_n>\sqrt{2W/m}$ kleiner als der klassische Wert 1 ist.Es ist $T=4u_1u_2/(u_1+u_2)^2$ mit (73) $u_1=\sqrt{u_n^2-2W/m}$ und $u_2=u_n$ .Dies liefert nur für sehr kleine Querenergien(443)der emittierten Elektronen eine deutlich von eins verschiedene Transmission.Sie ist für Werte von $E_\perp\gtrsim 1$eV ca.1 und ist bei $E_\perp=0,15$eV auf 0,85 gesunken. Diesen Querenergien entsprechen niederenergetische Elektronen ca.2eV,die unter flachen Winkeln emittiert werden.

Diese Elektronen sehen durch den Einfluß des etwa gleich schnellen Protons keine ungestörte Potentialstufe,da sie an der Oberfläche ausgelöst werden.Daher wird die quantenmechanische Transmissionsverringerung vernachlässigt.

C)Zusammenfassende Darstellung des Emissionsprozesses für flache Emissionswinkel.

Abb.40 illustriert in einer Übersicht die Auslösung der Elektronen durch streifende Ionen in der Reflexionsebene,die senkrecht zur Oberfläche ist.
Es sind die Geschwindigkeiten der Elektronen vor dem Stoß $\vec{v}_e$,nach dem Stoß mit dem Proton $\vec{u}$,und nach dem Durchtritt der Potentialstufe $\vec{w}'$,die Protonengeschwindigkeit $\vec{v}_p$,der Relativwinkel δ und Emissionswinkel γ im Laborsystem,sowie die Relativgeschwindigkeit w und der Streuwinkel Θ im Ruhsystem des Protons angegeben.
Die Teilbilder a),und b) zeigen die Grenzfälle niederer (ca.2,5 eV) und hoher Emissionsenergie(ca.20 eV).
Die schematischen Abbildungen zeigen,daß die Emissionsenergie bei festem Emissionswinkel γ durch den Relativwinkel δ bestimmt ist,wenn die Geschwindigkeit der Elektronen vor dem Stoß $|\vec{v}_e| = v_f$ ist (s.S.93).

Die Intensität der emittierten Elektronen ist einmal durch den Streuwinkel Θ,als auch durch die Zahl der mit dem Relativwinkel δ einfallenden Elektronen,die proportional zu $\sin\delta$ ist,gegeben.Sie fällt mit wachsendem Streuwinkel stark ab,und ist grob abgeschätzt:

$$I \sim \delta/(\Theta^2+\Theta'^2)^2 \; ; \; \Theta' \cong 50^o \cong 0{,}9$$

Dies erklärt die große Intensität des niederenergetischen Anteils der Elektronen in der Enegieverteilung,da mit wachsender Emissionsenergie einerseits der Streuwinkel anwächst und andererseits der Relativwinkel δ kleiner werden muß.

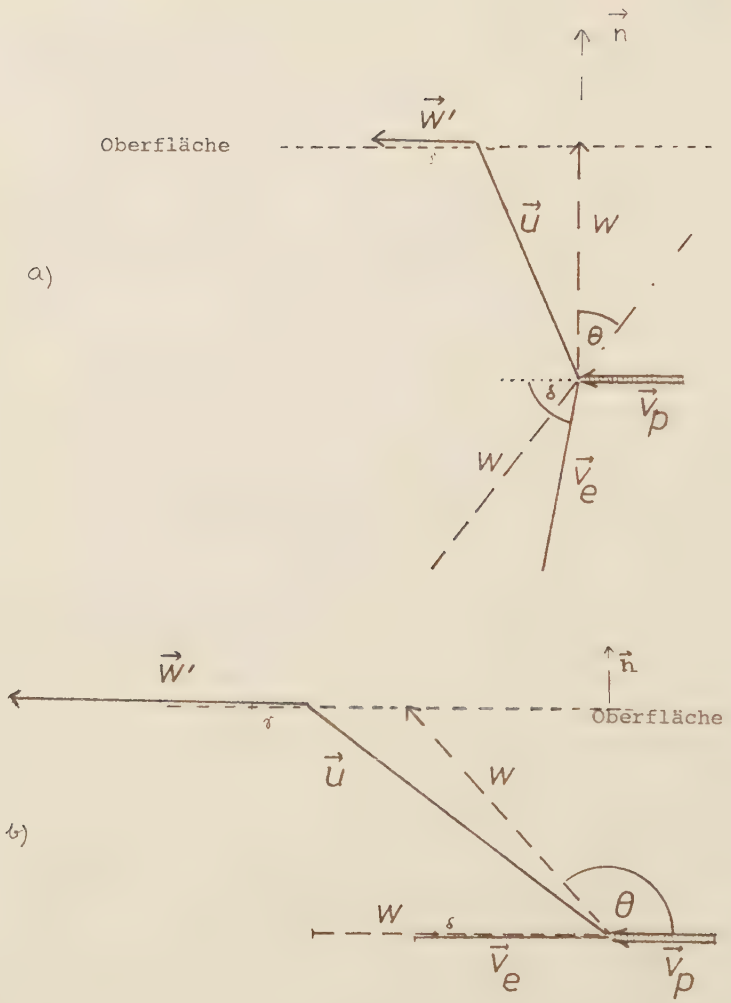


Abb.40 Auslösungsprozess nahezu streifend emittierter Elektronen a)niederer(≈2,5 eV) und b) hoher(≈22 eV) Energie.

——— Geschwindigkeiten im Laborsystem: $\vec{v}_e, \vec{v}_p, \vec{u}$ und $\vec{w}'$.

- - - Geschwindigkeiten im Ruhsystem des Protons: $w = |\vec{w}|$

δ Relativwinkel ; θ Streuwinkel.

KAPITEL 3

Reflexion des Ionenstrahls und Energieverlust

In diesem Kapitel werden zunächst Messungen zur räumlichen Verteilung der reflektierten Ionen und Neutralteilchen für unterschiedliche Einfalls-Winkel und -Energien sowie für variable Oberflächenbedeckungen vorgestellt,und anhand von Abschätzungen über den Weg der Teilchen und den Zustand der Oberfläche gedeutet. Im zweiten Teil wird der Energieverlust der reflektierten Teilchen angegeben und mit Theorien mehrerer Autoren verglichen,die Energieverluste infolge einzelner und kollektiver Anregung der Elektronen berechnet haben.Abschließend wird noch auf die Konsequenzen einer Ionenbewegung unter Berücksichtigung der Bildkraft nach Ohtsuki et al.(51)eingegangen.

A)Die Messungen:

Nach der Reflexion an der Oberfläche des Ni (110) Kristalls in der Geometrie der Abb.16 wird der vorher parallele Ionenstrahl räumlich aufgestreut,und zum überwiegenden Teil (≈99%) neutralisiert.
Die Teilchen verlieren dabei nur einige Prozent ihrer Energie und werden bei sauberen einkristallinen Oberflächen spiegelnd reflektiert.Die Reflexionsverteilung hat bei einem bestimmten Winkel α_r ein Maximum.Dieser Winkel wird als Reflexionswinkel bezeichnet.

Die Reflexionsfigur ist leicht asymetrisch um die Reflexionsrichtung α_r verteilt,da ein Teil des aufgestreuten Strahls an der oberflächenseitigen Hälfte infolge der Abschattung durch die Oberfläche fehlt.

1)Räumliche Verteilung:

Abb.41 zeigt eine Reflexionsverteilung emittierter Neutralteilchen $I^o(\alpha_a)$ eines einfallenden H_2^+-Ionenstrahls der Energie 5 keV in einer Dimension mit dem Austrittswinkel α_a in der Reflexionsebene der Teilchen.Die Schnittlinie der Reflexionsebene mit der Oberfläche kennzeichnet $\alpha_a=0^o$.
Die Halbwertsbreite der Verteilung ist mit $\Delta\alpha$ bezeichnet.

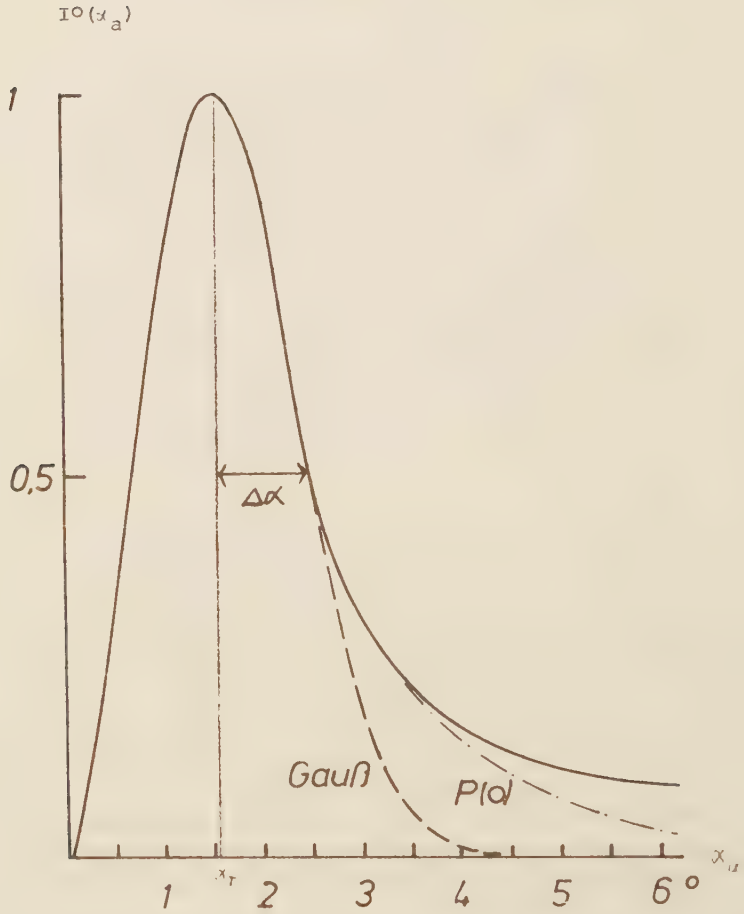


Abb.41 Reflexionsverteilung $I^{o}(\alpha_a)$ der emittierten H-Atome bei Einfall von 5 keV H_2^+-Ionen unter α_{in}=1,5°.Das Maximum der Verteilung wird als Reflexionswinkel α_r bezeichnet——. Näherung durch Gaußverteilung - - - ,und Poissonverteilung -·-·-.

Die Auflösung des Detektors (s.Kap.1F2)von $0{,}25^{o}$ ist in der Reflexionsverteilung der Abb.41 in Form einer Verschmälerung der Flanken von je $0{,}125^{o}$ berücksichtigt.
Die Verteilung läßt sich für Richtungen nahe der Reflexionsrichtung im Rahmen der Meßgenauigkeit durch eine Gaußverteilung mit Varianz Δ_1 nähern.

$$I^{o}(\alpha_a) = \exp(-(\alpha_a-\alpha_r)^2/\Delta_1^2) \qquad |\alpha_a-\alpha_r| < \Delta\alpha \quad (3.1)$$

Bei größeren Abweichungen der Richtungen der austretenden Teilchen von der Reflexionsrichtung wird die Verteilung durch zufällig gestreute Teilchen Bestimmt.Für $\alpha_a > \alpha_r+\Delta\alpha$ kann durch eine Poissonverteilung P(o) mit Varianz Δ_2 genähert werden.

$$I^{o}(\alpha_a) = \exp(-(\alpha_a-\alpha_r)/\Delta_2) \qquad \alpha_a > \alpha_r+\Delta\alpha \quad (3.2)$$

Bei sehr stark bedeckten ($\theta_c \approx 5$ML)oder rauhen Oberflächen ist dieser Streuanteil vorherrschend.Die eigentliche Reflexion ist stark vermindert oder nicht mehr zu erkennen. Eine Reflexionsfigur,wie sie in Abb.41 gezeigt ist,wurde selbst bei gut orientierten (besser $0{,}2^{o}$) und ausgeheilten Proben erst nach langer Kathodenzerstäubung mit einer Dosis von ca. 10^{17} H_2^+-Ionen der Energie 5 keV,die streifend ($2-4^{o}$)eingeschossen wurden,erhalten.
Die Halbwertsbreite $\Delta\alpha$ der Verteilung I^{o} ist in Abb.41 angegeben.Aus ihr folgt die Varianz in (3.1)oder (3.2) zu $\Delta_1=1{,}20\,\Delta\alpha$ und $\Delta_2=1{,}44\,\Delta\alpha$.
Die Reflexionsfiguren der beiden geladenen Zustände H+ und H- entsprechen in Bezug auf den Reflexionswinkel wie auch die Halbwertbreite $\Delta\alpha$ der Aufstreuung im Rahmen der Meßgenauigkeit von $0{,}25^{o}$ der Reflexionsfigur der neutralen Teilchen.

2)Überreflexion:
Die Reflexion verläuft für nicht zu kleine Winkel nach Abb. 42 ,wo Einfalls- und Ausfallswinkel gegenein-

ander aufgetragen sind spiegelnd,d.h. die beiden Winkel sind gleich.Unter 1,5 ° ist der Reflexionswinkel leicht größer als der Einfallswinkel.Dies ist außer den angegebenen 5 keV H_2^+ Ionen auch bei 5 keV Protonen beobachtet.

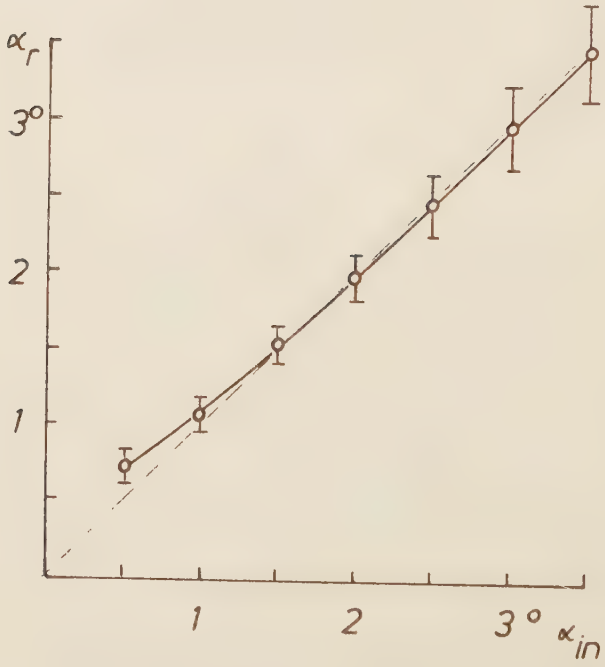


Abb.42 Einfallswinkel α_{in} und Reflexionswinkel α_r bei streifender Reflexion von 5 keV H^+ oder H_2^+-Ionen an Ni(110) ———.
Zum Vergleich: $\alpha_{in}=\alpha_r$ - - - -.

3)Halbwertsbreite

a) Winkelabhängigkeit

Abb. 43 zeigt die Halbwertsbreite $\Delta\alpha$ der Reflexionsfigur einfallender 5 keV H_2^+ Ionen und emittierter 2,5 keV H-Atome.Sie bleibt bis zu Reflexionswinkeln von 2,5° nahezu konstant und steigt darüberhinaus sprungartig an.Der Knickpunkt der Kurve bezeichnet den kritischen Winkel α_{kr},bei dem die geordnete Reflexion durch korrelierte Stöße mit den Atomketten der Oberfläche in Einzel- und Mehrfachstöße mit einzelnen Oberflächenatomen übergeht.Das bewirkt die plötzlich ansteigende Aufstreuung.

b)Energieabhängigkeit

Abb.44 zeigt die Halbwertsbreite des reflektierten Strahls für unterschiedliche Ionenenergien von 1 bis 6 keV/Nukleon bei einer Reflexion von H^+ oder H_2^+-Ionen unter $\alpha_r=2°$.Die Halbwertsbreite $\Delta\alpha$ zeigt neben einer generellen Vergrößerung bei kleineren Geschwindigkeiten eine leichte Erhöhung bei Molekülionen gegenüber Protonen.Dies kann durch die Auseinanderbewegung der Fragmente nach der Dissoziation erklärt werden.
Die Messung besagt,daß die Reflexionsfigur die Tendenz hat,bei wachsender Teilchengeschwindigkeit schmäler zu werden.

4)Bedeckung:

Der Einfluß einer Kohlenstoffbedeckung Θ_C der Oberfläche auf die Aufstreuung des reflektierten Strahls ist für Bedeckungen zwischen 0,01 und 1,5 Monolagen in Abb. 45 gezeigt.Die Bedeckung vergrößert in diesem Bereich die Halbwertsbreite um etwa das doppelte,wobei die größte Änderung sich bei kleinen Bedeckungen unterhalb von 0,4 Monolagen ereignet.

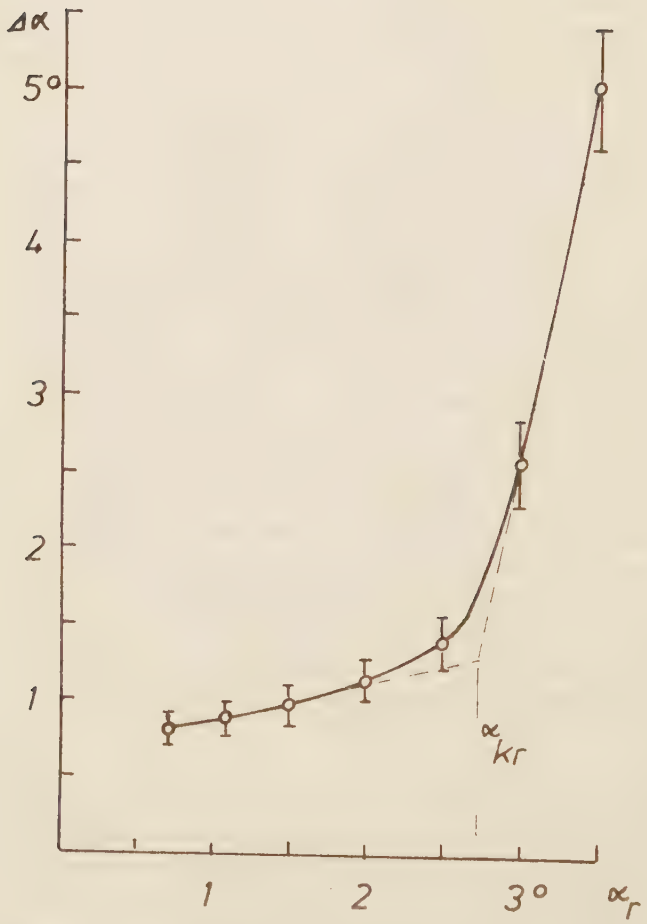


Abb.43 Aufstreuung $\Delta\alpha$ des reflektierten Strahls bei unterschiedlichen Reflexionswinkeln α_r. Ein-und Ausfallswinkel α_{in} bzw. α_r hängen voneinander nach Abb.42 ab.
--- α_{kr} ist der kritische Reflexionswinkel. Die einfallenden H_2^+-Ionen haben die Energie 5 keV.

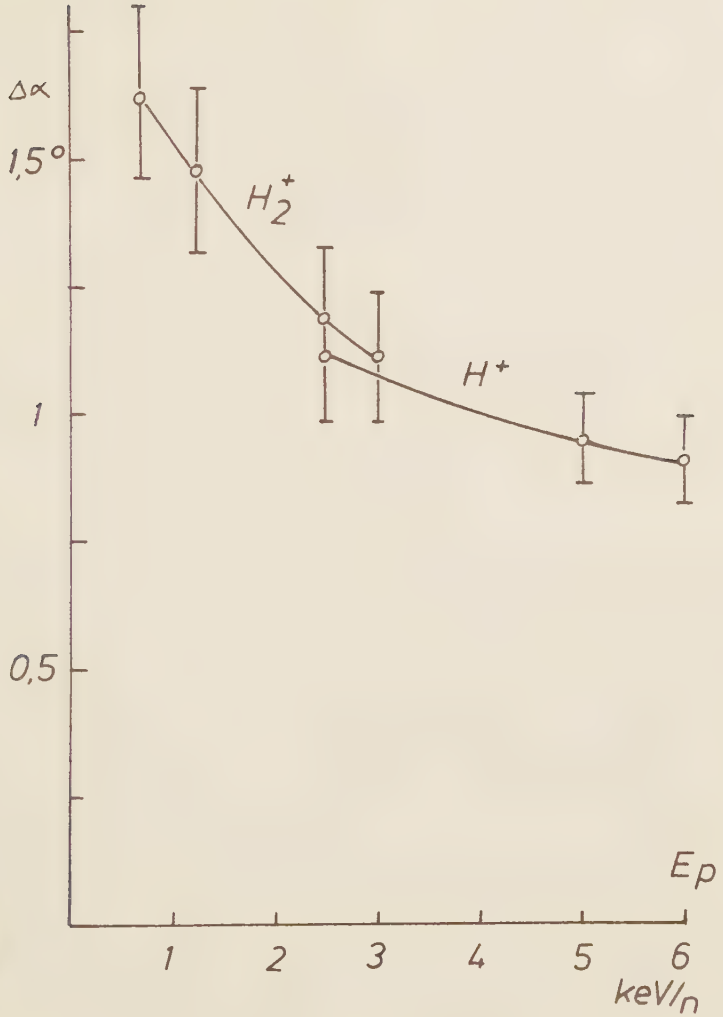


Abb.44 Aufstreuung $\Delta\alpha$ des reflektierten H^+ und H_2^+ -Strahls bei $\alpha_r = 2^o$ für unterschiedliche Ionenenergien E_p.

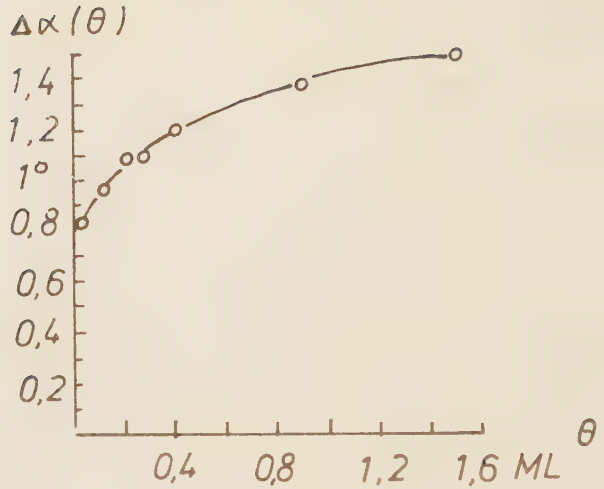


Abb.45 Aufstreuung des reflektierten Strahls $\Delta\alpha$ bei unterschiedlichen Oberflächen-Bedeckungen θ.

B) Interpretation der Messungen

1) klassische Bahn:

Nach Lindhard(52) darf bei Streuung atomarer Teilchen an einem Potential der Weg als klassisch angesehen werden, wenn ihre Wellenlängen $\lambda = \hbar/Mv_p$ klein sind gegen

$$1/(d/dp)(1/\alpha(p)) \qquad (3.3)$$

mit α =Ablenkung

p =Streuparameter.

Für ein Coulombpotential ist bei kleinen Ablenkwinkeln $\alpha = b/p$, für ein abgeschirmtes Coulombpotential mit Abschirmlänge $l_s = 1/k_s$ (3.15f) ist

$$\chi = (b/p)/(1+(p/Cl_s)^2) \qquad (3.4)$$

mit b = Stoßdurchmesser; $b = 2Z_1Z_2e^2/Mv_p^2$

Z_i Ordnungszahlen von Projektil und Target

M Projektilmasse, reduziert

C Faktor der Größe 1,73; $C^2 \approx 3$

v_p Projektilgeschwindigkeit

Gln.(3.3,4) führen mit $v_o = e^2/\hbar$ zur Bedingung für eine klassische Bahn:

$$b/\chi = 2Z_1Z_2v_o/v_p > 1+(p/l_s)^2 \qquad (3.5)$$

In diesem Experiment ist b/χ von der Größenordnung 100, und $p/l_s < 1$. Daher ist Gl.(3.5) gut erfüllt.

2) Oberflächenpotential und Eindringtiefen

Die Ionen werden bei spiegelnder Reflexion unter kleinen Winkeln von einem kontinuierlichen Potential an der Oberfläche abgelenkt. Ein Ansatz zur Bestimmung des Potentials ist die Überlagerung der Wechselwirkungen des abgeschirmten Ions im Abstand s von der Oberfläche mit den Atomen des Festkörpers. Dies ergibt mit dem (103) Thomas-Fermi-Moliere-Potential (TFM) für Protonen (Z_1=1) und Ni(Z_2=28):

$$V(s) = \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 a}{d_1 d_2}\left(0{,}017e^{-\frac{6s}{a}} + 0{,}46e^{-\frac{1{,}2s}{a}} + 1{,}17e^{-\frac{0{,}3\,s}{a}}\right) \qquad (3.6)$$

mit $a = 0{,}885a_o/Z_2^{1/3}$ Thomas-Fermi-Radius

d_1, d_2 Abstände der Atomketten und Atome in den Ketten an der Oberfläche.

Es ist in Abb. 46 dargestellt.

Die Bildkraft durch die Elektronenwolke an der Oberfläche liefert ein zusätzliches Potential. Es ist für Protonen anziehend und hängt von der Geschwindigkeit ab. Dieses Potential wurde von Ohtsuki et al.(51) berech-

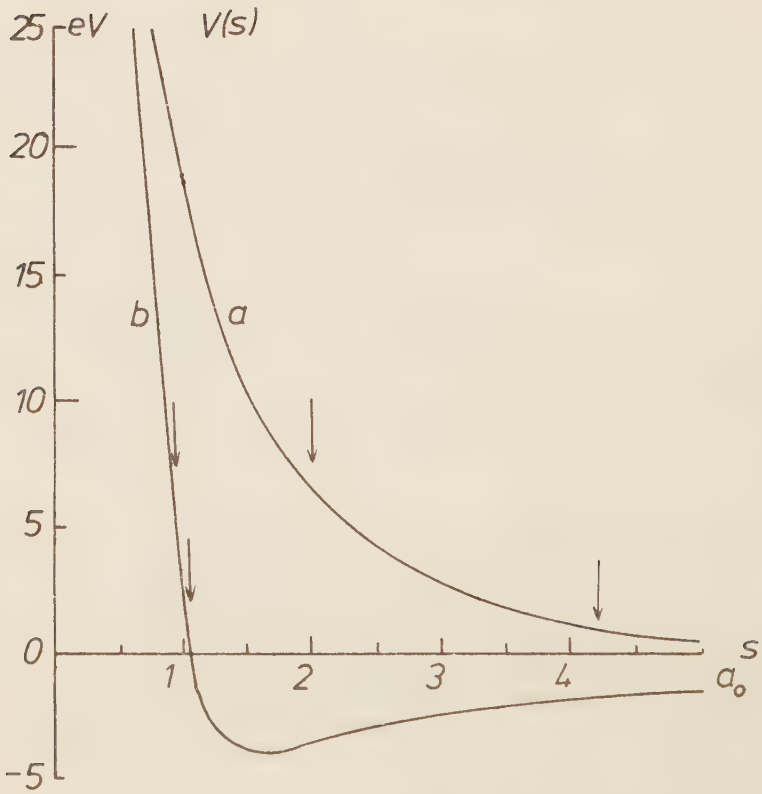


Abb.46 Das planare Oberflächenpotential V(s) einer Ni (110)-Oberfläche in Normalenrichtung s. (a) Thomas-Fermi-Molière-Näherung und (b) mit Berücksichtigung der Bildkraft für 5 keV Protonen (v_p=0,45v_o) nach Ohtsuki (51).Die Pfeile entsprechen jeweils Umkehrpunkten bei Querenergien von 0,5 und 6,0 eV.

net und ist in der Kurve der Abb.46 b) berücksichtigt.
Die Protonen haben für unterschiedliche Querenergien $E_\perp = E_p \sin^2\alpha_r$ im Falle des TFM-Potentials stark verschiedene Umkehrabstände, sie sind für $E_\perp < 25$ eV bei Berücksichtigung der Bildkraft b) nahezu konstant bei $s_o \approx a_o$.

3) Die Aufstreuung

a) Stöße

Beim Durchgang durch den Elektronendichteausläufer an der Oberfläche verliert das Ion oder Teilchen bei Stößen mit einzelnen Elektronen kleine Energiebeträge von größenordnungsmäßig 10 eV. Die entsprechenden Impulsbeträge liegen im Mittel bei mv_p, und die Ablenkungen sind bei etwa 10 Stößen auf dem Reflexionsweg der Teilchen $\approx \sqrt{10}\, mv_p/Mv_p$. Dies ergibt eine Aufstreuung von ca. $0{,}1^o$ und spielt nur eine kleine Rolle bei der Gesamtaufstreuung von ca. 1^o.

b) Oberflächenmosaik

Die Oberfläche hat über den ganzen Kristall betrachtet einkristalline Bereiche, deren Oberflächenorientierung gegenüber einer mittleren Orientierung leicht verkippt sein kann. Sie haben eine Verteilung, deren Varianz aus Röntgenreflexen auf $< 0{,}2^o$ abgeschätzt werden kann. Dies führt zu einer entsprechenden Verteilung der Reflexionsfigur der Ionen.

4) Coulombexplosion

Bei der Dissoziation des H_2^+-Moleküls im Elektronendichteausläufer an der Oberfläche werden die Fragmente bis zu einem gegenseitigen Abstand von der Größenordnung der Abschirmlänge $l_s(s)$ beschleunigt. Die Abschirmlänge ist für Ni im Abstand s von der Oberfläche nach Gl.(4.5b)

$$l_s(s) = 0{,}97 a_o \exp(s/5{,}4 a_o).$$

Die aus der potentiellen Energie V des Moleküls gewonnene kinetische Energie T ist für jedes Teilchen

$$T=-(1/2)V(b_o-l_s(s))=(E_o a_o/2)\left(\frac{1}{b_o}-\frac{1}{l_s(s)}\right) \qquad (3.7)$$

mit $b_o = 2{,}44 a_o$ mittlerer Bindungsabstand des H_2^+-Ions
$E_o = me^4/\hbar^2 \cong 27{,}2\,eV$; $a_o = \hbar^2/me^2 \cong 0{,}53 \cdot 10^{-8}\,cm$
und $l_s(s) > b_o$.

Dies liefert keine Winkelaufstreuung, wenn das Molekül in einem Oberflächenbereich zerfällt, in dem die Abschirmlänge kleiner als b_o ist. Das ist bei Ni für $s \leq 5a_o$ erfüllt. Eine obere Abschätzung der kinetischen Energie weniger Moleküle, die ca. $7a_o$ außerhalb der Oberfläche zerfallen liefert T=1,7 eV und einen Streuwinkel Θ, wenn zumindest ein Bruchstück nach Verlassen der Oberfläche neutral ist:

$$\Theta=(T/E_p)^{1/2} \qquad (3.7a).$$

Dabei ist E_p die Energie eines Nukleons. Gl.(3.7a) ergibt mit T=1,7eV und E_p=2,5 keV eine mittlere Aufstreuung von $1{,}5^o$.

Die Coulombexplosion sollte bei Reflexion von Molekülionen eine etwas vergrößerte Aufstreuung gegenüber der Reflexion von Protonen gleicher Geschwindigkeit bewirken.

5) Störungen der idealen Oberfläche

Ein Teil der Ionen trifft auf lokale Streuzentren an der Oberfläche. Dies bewirkt eine Aufstreuung, die sich besonders bei flachen Winkeln zeigen sollte, da die Weglängen an der Oberfläche vergrößert sind. Die nur leicht aufgestreuten Teilchen verschieben die Reflexionsverteilung so, daß ihr Maximum bei einem etwas größeren Wert erscheint, als aufgrund spiegelnder Reflexion erwartet werden kann. So ließe sich die in Abb.42 dargestellte und beobachtete Überreflexion erklären. Die Aufstreuung sollte nach der Rutherfordschen Streuformel im Falle eines abgeschirmten Coulombpotentials mit wachsender Geschwindigkeit der Teilchen bei Streuung an einem Streuzentrum abnehmen, wie es in Abb.44 gemessen wurde.

C) Elektronischer Energieverlust der Ionen bei der Reflexion

1) Die Messung

Abb.47 zeigt die relativen Energieverluste $\Delta E_p/E_p$ von 5 keV Wasserstoffionen, bezogen auf die Anfangsenergie der Teilchen. Sie waren für alle einfallenden Ionensorten H^+, H_2^+ und H_3^+ innerhalb der Meßgenauigkeit von ca.2% von gleichen Wert, jedoch für die emittierten H^--Ionen im Mittel deutlich höher. Die Winkelabhängigkeit des Energieverlustes vom Reflexionswinkel α_r zeigt jeweils etwa gleiche Werte für 1^o und 2^o sowie eine Verringerung bei 3^o.

Die nach der Lindhardschen Theorie(2) zu erwartende Geschwindigkeitsabhängigkeit konnte nicht mehr aufgelöst werden, da sie eine wesentlich genauere Messung erfordert hätte. Der Energieverlust der Neutralteilchen sollte etwas geringer als der der Ionen sein (3).

2) Theorie

a) Energieverlust durch Stöße mit einzelnen Elektronen.

Ferrell und Ritchie(3) haben den Energieverlust eines Protons im Elektronengas für Geschwindigkeiten v_p kleiner als v_f selbstkonsistent berechnet. Sie finden für Einzelanregungen eine Abhängigkeit von der Protonengeschwindigkeit v_p und der Dichte des Valenzelektronengases n(s) (4.5c)

$$n(s)=3/4\pi\ a_o^3 r_s^3(s)$$

mit s als Abstand von der Oberfläche. Die auf dem Weg dx verlorene Energie wird unter Berücksichtigung exponentieller Abschirmung des Ions als Gl.(3.8) in atomaren Einheiten E_o/a_o sowie mit $A=2/3\pi\cong 0{,}21$ und $\beta=(4/9\pi)^{1/3}/\pi \cong$ $\cong 0{,}167$ angegeben:

$$dW(s)/dx = (Av_p/v_o)\left\{ \ln\left(\frac{1+\beta r_s(s)}{\beta r_s(s)}\right) - \frac{1}{1+\beta r_s(s)} \right\} \qquad (3.8)$$

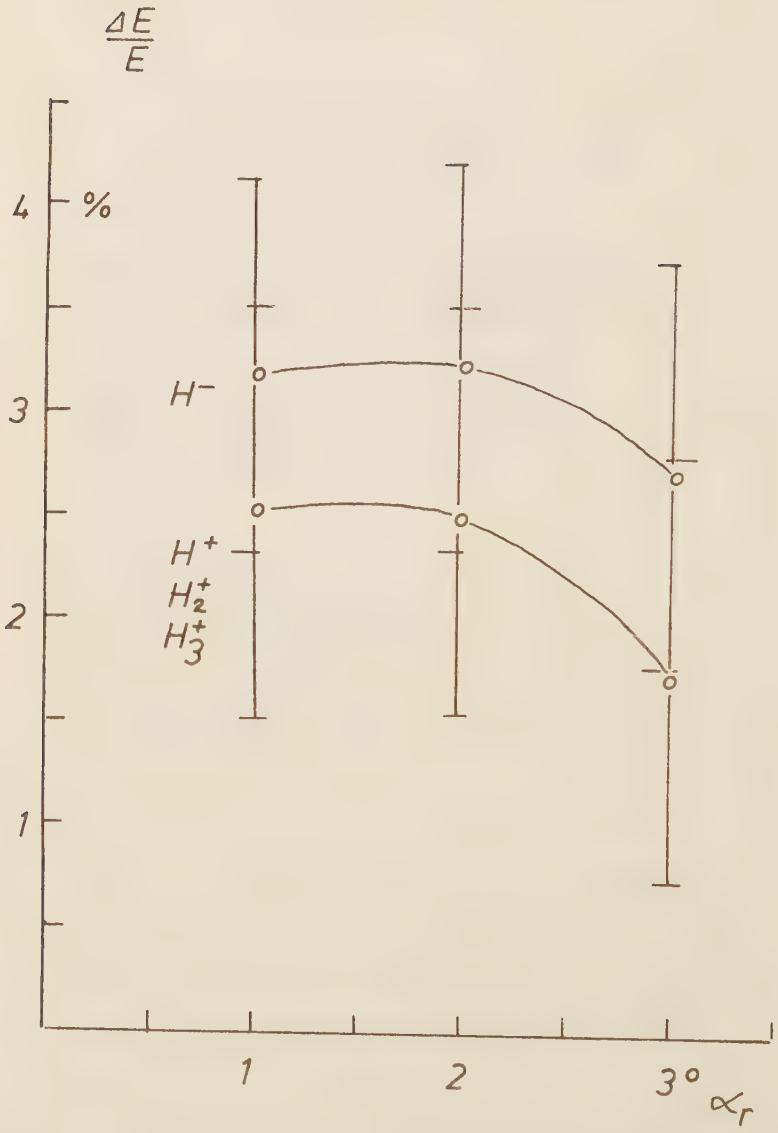


Abb. 47 Energieverlust der streifend reflektierten Ionen bei unterschiedlichen Reflexionswinkeln α_r

Für eine Oberflächenladungsdichte nach Gl.(4.20):

$$n(s)=(n_o/2)\exp(-s/a_s)$$

läßt sich dW(s)/dx aus (3.8) an jedem Abstand s von der Oberfläche mit $r_s(s)$ aus (4.5c) mit r_s als Wert des Elektronenradiusparameters im Festkörper berechnen.Es ist nach (4.5c)

$$r_s(s)=1{,}26\, r_s \exp(s/3a_s) \quad .$$

Eingesetzt in (3.8) mit $r_s=1{,}8$; $a_s=0{,}9a_o$ für Ni nach (4.20) erhält man dW(s)/dx.Abb.48 zeigt die Funktion

$$(v_o/v_p)dW(s)/dx$$

Sie läßt sich analytisch durch

$$B \exp(-s/2{,}4a_s) \qquad ; s>0 \qquad (3.9)$$

mit $B = 13\cdot 10^{-2}$ a.u. = 3,5 eV/a_o
nähern.

Damit ergibt (3.9) auf dem Weg der Ionen C an der Oberfläche mit einem Umkehrpunkt $s_o>0$ einen Energieverlust W:

$$W=\int_C (dW(s)/dx)\cdot dx \qquad (3.10)$$

Für den Weg der Teilchen an der Oberfläche wurde eine hyperbolische Kurve angenommen.Sie ist ausführlich in Kap.4 S. 144 mit Abb. 57 diskutiert.Die senkrechte bzw. parallele Komponente s(t) oder p(t) des Weges lassen sich nach der Zeit t parametrisieren als Gl.(4.26 a,b):

$$s(t)=\sqrt{v_\perp^2 t^2+a_s^2}-s_2 \quad ; p(t)=(v_p\cos\alpha_r)t \approx v_p t \text{ für}$$

Reflexion unter flachen Winkeln $\alpha_r \ll 90^o$.Da $v_\perp \ll v_p$ ist, folgt $dx=dp=v_p dt$ und mit(3.10):

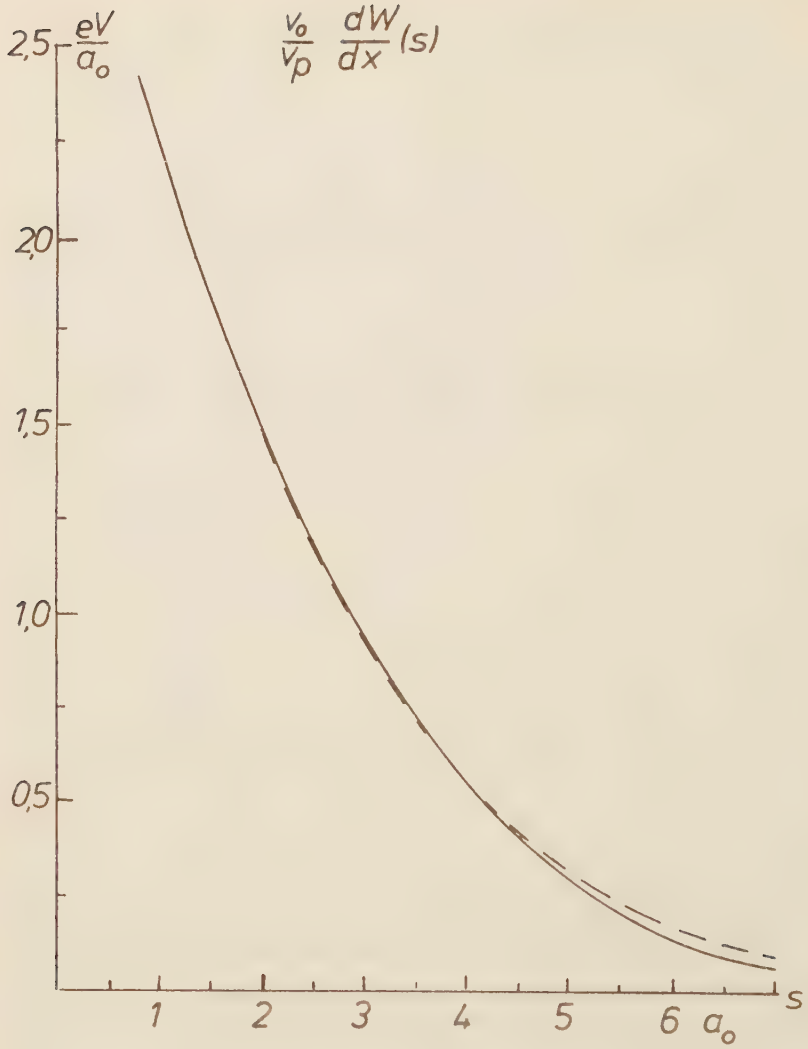


Abb.48 Der elektronische Energieverlust $(v_p/v_o)dW(s)/dx$ bei Einzelanregungen durch Protonen mit $v_p < v_o$ in Abhängigkeit vom Oberflächenabstand s ———.
Die Näherungskurve $B \cdot \exp(-s/2{,}4a_s)$;B=3,5eV/a_o - - -.

$$W=(Bv_p^2/v_o)\int_{-\infty}^{\infty}dt\ \exp(-(\sqrt{v_\perp^2t^2+a_s^2}-s_2)/2,4a_s) \qquad (3.11)$$

mit $s_2=a_s-s_o$ nach (4.26b),der Substitution $y=v_\perp t/2,4a_s$ folgt mit veränderten Integrationsgrenzen:

$$W=(7,3\ Ba_sv_p^2/v_ov_\perp)\exp(-s_o/2,4a_s)\int_0^{\infty}dy\ \exp(-\sqrt{y^2+0,17}) \qquad (3.12)$$

Dies läßt sich zu

$$W=21,7\ eV\ (v_pa_s/v_oa_o\sin\alpha_r)\exp(-s_o/2,4a_s) \qquad (3.12a)$$

auswerten.Gl.(3.12a) ergibt für 5 keV Protonen ($v_p=0,45v_o$) bei einem Umkehrabstand s_o von 1,2 a_o nach Kap.3B2,4D5 und 4F1 elektronische Energieverluste durch Einzelanregungen von 290,145 und 100 eV bei Reflexionswinkeln von 1,2 und 3°.

b)Energieverluste infolge kollektiver Anregungen:

Die Anregung von Oberflächenplasmonen ist trotz der kleinen Geschwindigkeit ($v_p<v_f$) der Protonen bei streifendem Einfall nicht vernachlässigbar klein.Nach Ferrell und Ritchie (3) ist die durch Plasmonenanregung bei streifender Reflexion verlorene Energie

$$E_{pl}=(v_p/v_f)^2(2\hbar w_sv_o/3v_f\sin\alpha_r) \qquad (3.13)$$

mit $w_s=w_p/\sqrt{2}$ Oberflächenplasmafrequenz;w_p Plasmafrequenz und v_f Fermigeschwindigkeit.In atomaren Einheiten(2.30a) ist

$$E_{pl}=(v_p/v_o)^2\cdot 0,115\ E_or_s^{3/2}/\sin\alpha_r$$

Für 5 keV Protonen ($v_p=0,45v_o$) und Ni ($r_s=1,8$) folgen Energieverluste durch kollektive Anregungen bei Refle-

xionswinkeln von 1,2 und 3°,die bei jeweils 90 eV,45 eV und 30 eV liegen.

Lukas (54) berechnet die Anregung von Oberflächenplasmonen durch das Feld streifend reflektierter Protonen mit Berücksichtigung der Eindringtiefe zu

$$E_{pl} = Qw_s$$

mit

$$Q=(2v_o/v_\perp)\int_\delta^\infty dz\, K_o(z) \qquad (3.14)$$

und

$$\delta=(2w_s/k_s v_p)(1+k_s s_o) \qquad (3.15)$$

$k_s=\sqrt{3}w_p/v_f \cong 1,56/a_o r_s^{1/2}$ T.F.-Abschirmwellenvektor

$s_o=1,2\ a_o$ Umkehrpunkt der Ionen nach S.115

sowie K_o als modifizierter Besselfunktion O.Ordnung. In atomaren Einheiten (2.30a) folgt unter obigen Bedingungen für 5 keV Protonen an Ni:

$$\delta=(1,56/r_s)(1+(1,56 s_o/a_o r_s^{1/2}))(v_o/v_p)\cong 4,6 \qquad (3.15a)$$

Für $\delta<2$ läßt sich Gl.(3.14) durch

$$Q=(2v_o/v_\perp)\sqrt{\pi/2\delta}\ e^{-\delta} \qquad (3.14a)$$

nähern.Dies ergibt Energieverluste von 30 eV,15 eV und 10 eV für Reflexionswinkel von jeweils 1,2 und 3°.

c) Gesamtenergieverlust:

Aus den Gln.(3.12a,13,14a) ergibt sich ein Gesamtenergieverlust von ca.160 eV bei streifender Reflexion von 5 keV Protonen unter 2° an der Ni(110)-Oberfläche.Er setzt sich zu 145 eV aus Einzelstößen und zu ca.15 eV als wahrscheinlichster Wert der Gln.(3.13,14a) aus Plasmonenanregung zusammen.Demnach erleidet das Ion auf seiner Bahn etwa 15 Stöße mit Elektronen bei mittleren Energieübertragungen von 10 eV und regt ein Oberflächenplasmon der Energie 15 eV (79) an.Die mittlere Zahl der emittierten Elektronen ist nach Kap.2 als 3,4 gemessen.

Bei Reflexionswinkeln von 1^{o},2^{o} und 3^{o} ergeben sich relative Energieverluste von 6%,3% und 2%.Dies ist für Winkel von 2^{o} und 3^{o} in Übereinstimmung mit der Messung. Für den flachen Reflexionswinkel von 1^{o} ergibt die Messung mit ca.2,5% einen deutlich niedrigeren relativen Energieverlust als Berechnung.

D)Bildkraft durch dynamische Abschirmung

Ohtsuki et al.(51) haben den Weg eines Protons an der Oberfläche betrachtet,das infolge einer dynamischen Abschirmung durch Elektronenanhäufung in der Bildebene einem anziehenden Potential ausgesetzt ist.

Sie berechnen eine Hin-und Herbewegung ("skipping motion") der Protonen zwischen der obersten Atomkette und einer Schicht im Abstand einiger a_o.Die Ionen führen einige Oszillationen mit Periodenlängen $L_o$aus,wenn der Reflexionswinkel einen Ablenkwinkel Ψ unterschreitet,der zu

$$\Psi = (\sqrt{\pi}/2)(\hbar v_o w_s / v_p E_p)^{1/2} \qquad (3.16)$$

angegeben ist,was für 5 und 2,5 keV Protonen Winkel Ψ von 4,1° und 6,9° ergibt.

Die Reflexionsverhältnisse sind für 30 keV H^+ und Ni(100) sowie 30 u.100 keV und Ni(110) mittels Computersimulation ausgeführt.Sie finden Wellenlängen in der Größenordnung 50-70nm und im Mittel 2 Oszillationen.Für ca.5 keV Protonen ergäben sich aufgrund des größeren Ablenkwinkels L_o von etwa 20-40nm.

Die Hin-und Herbewegung sollte zu einem Emissionswinkel führen,der etwas kleiner als der Einfallswinkel ist,während er ohne die Bildkraft bei kleinen Reflexionswinkeln leicht über dem Einfallswinkel bleiben sollte.

Die Experimente (Abb.42)zeigen bei sehr kleinen Winkeln einen etwas gegen den Einfallswinkel vergrößerten Emissionswinkel.

Weiterhin müßte der Energieverlust aufgrund des etwa verzehnfachten Weges um eine Größenordnung höher als die gemessenen (Abb.47) und nach (3.12-14)berechneten Werte liegen,bei ca.40%,was sicherlich auszuschließen ist.

Schließlich müßte der Übergang bei Erreichen der kritischen Winkel Ψ bewirken ,daß die Emission von Sekundärelektronen deutlich im Bereich $\alpha_r < \Psi$ ansteigt,was nach Abb.22,22 ebenfalls nicht gefunden wurde.

Insofern scheint sich die Theorie zur Beschreibung streifender Reflexion von Protonen kleiner Energien ($v_p < v_f$), möglicherweise wegen der nahezu vollständigen Neutralisation (99%),nicht anwenden zu lassen.

KAPITEL 4

Umladung von Wasserstoffionen,die unter flachen Winkeln an Ni (110)-Oberflächen reflektiert werden.

In diesem Kapitel werden Messungen zur Aufnahme von Elektronen bei streifender Reflexion von H-Ionen dargestellt und mit einigen Modellen zur Umladung verglichen. Soweit in den folgenden Abbildungen Winkel genannt werden, sind die Austrittswinkel α_r im Maximum der Reflexionsverteilung der von der Oberfläche reflektierten Teilchen gemeint.Sie unterscheiden sich nach Abb.42 nur unterhalb von $1,5^o$ geringfügig vom Einfallswinkel der Teilchen.

Die angegebenen Energien keV/nucl. beziehen sich auf die Energie eines Teilchens E_p.Die Geschwindigkeit des Ions ist dann in atomaren Einheiten v_o nach (2.29 a):

$$v_p = (E_p/25 \text{ keV})^{1/2} \cdot v_o$$

Die einfallenden Teilchen waren bei E_p=1,7 keV H_3^+-Ionen der Energie 5 keV,bei E_p = 2,5 bzw. 3 keV H_2^+ -Ionen der Energie 5 bzw.6 keV,und ab E_p=4 keV Protonen.

Da sich der entgültige Ladungszustand der Teilchen erst beim Verlassen der Oberfläche einstellt (55),(56), und die ankommenden Ionen mit hoher Wahrscheinlichkeit dissoziieren (38),(57) ,erscheint es berechtigt,nahezu alle ankommenden Molekülionen bei der Reflexion als einzelne Protonen entsprechender Geschwindigkeit zu betrachten,was sich auch in vielen Messungen zur Umladung schon gezeigt hat (58)(59)(60).Eine kleiner Teil der reflektierten H_2^+ - Molekülionen von etwa $1o^{-3}$ -$1o^{-4}$ überlebte,wie in Abb. 55 zu sehen ist.

Die Strahlrichtung war bei allen Messungen die [211]-Richtung auf der (11o)-Oberfläche. Das Material war,wenn nicht anders vermerkt,reines Nickel mit einer Bedeckung unter 0,01 ML.Zum Vergleich für die Umladung zum H^- -Ion wurde auch eine Cu-Oberfläche der gleichen Orientierung herangezogen.Außerdem wurde der Einfluß von Fremdatombedeckung der Oberfläche untersucht.

Definition der Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Ladungszustände:

Die Wahrscheinlichkeit für die Reflexion als

H^+-Ion	wird als W^+	oder W^+-Verhältnis
H -Atom	W^o	W^o- "
H^--Ion	W^-	W^-- "
H_2^+-Ion	$W(H_2^+)$	$W(H_2^+)$- "

bezeichnet. Mit $N(H_i)$ als Anzahl der reflektierten Teilchen der Sorte H_i ist die Gesamtzahl N_{total} unter Vernachlässigung der sehr kleinen Anzahl $N(H_2^+)$

$$N_{total}=N(H^+)+N(H)+N(H^-) \tag{4.1}$$

und damit

$$W^+ = N(H^+)/N_{total} \cdot \tag{4.2}$$

Für W^o, W^- und $W(H_2^+)$ gilt (4.2) entsprechend.

Der in der Summe (4.2) weitausüberwiegende Term ist N(H), der Anteil der Neutralteilchen, er macht in dem gemessenen Energiebereich ca.99% aus .
Aus den Definitionen (4.1) folgt für die Neutralisation

$$W^o = 1 - W+ - W^-$$

Die Wahrscheinlichkeiten W^i sind in Anhängigkeit von der Energie/Teilchen (implizit:der Geschwindigkeit) und dem Ausfallswinkel gemessen, und in den folgenden Abbildungen dargestellt.

A) Die Messungen

1) Das W^+-Verhältnis

Abb.49 zeigt W^+, die Emissionswahrscheinlichkeit für Protonen bei bei Reflexion von Protonen der Energie 1,7 bis 6,7 keV/n. unter einem Winkel von 2^o. Dabei ist die Einheit keV/n.≡keV/nucleon.

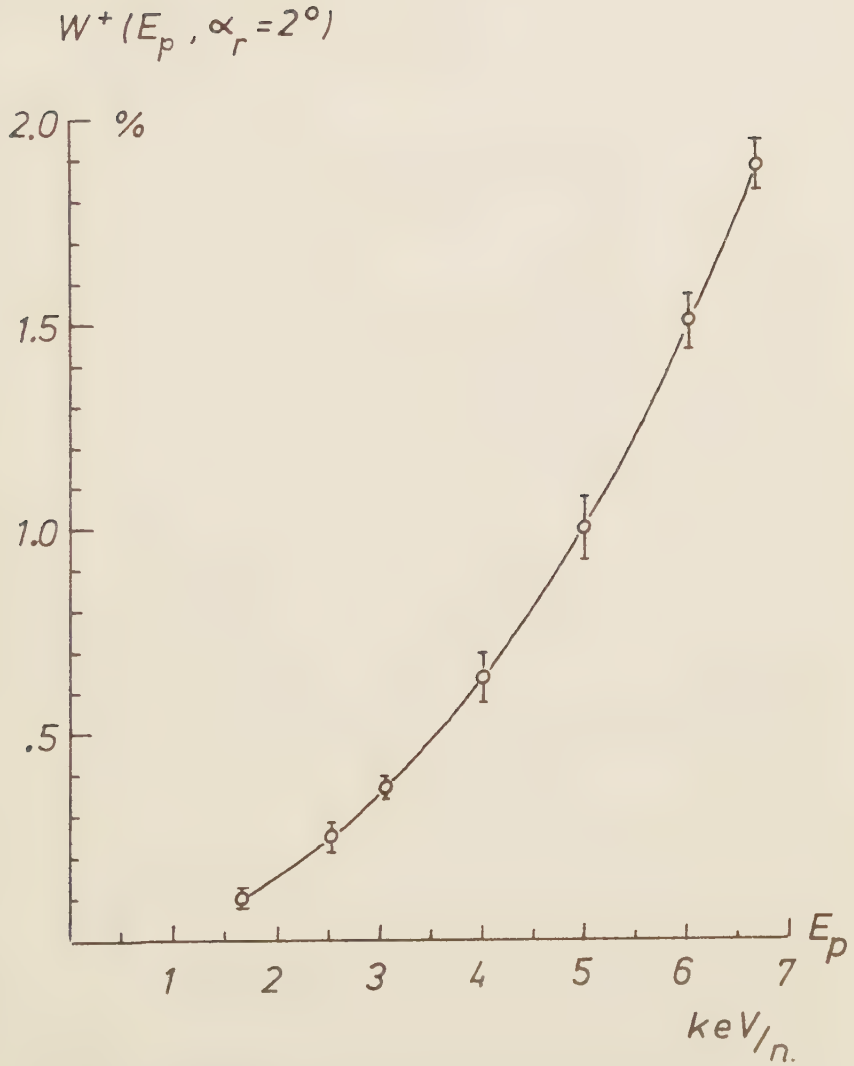


Abb.49 Positiver Ladungszustand nach der Reflexion von Wasserstoffionen unter 2° mit der Energie E_p.

Die entsprechenden Geschwindigkeiten sind 0,26-0,52 v_o.
Die Kurve bewegt sich zwischen den Werten 0,1 und 2% und steigt mit der Energie zunehmend an.
Sie verläuft glatt und zeigt keinerlei oszillatorisches Verhalten. Rückstreumessungen (59) haben bei größeren Austrittswinkeln (45°) der Teilchen etwa 5 mal größere W^+-Verhältnisse und einen linearen Anstieg mit der Energie ergeben. (Siehe auch Abschnitt C3)
Die Messungen zeigten im Rahmen der Meßgenauigkeit keinen Unterschied für das W^+-Verhältnis bei Protonen der Energie 2,5 keV und H_2^+-Ionen von 5 keV, also Ionen gleicher Geschwindigkeit.

Abb. 50 zeigt den Anstieg von W^+ mit der Energie für Reflexionswinkel von 1,2 und 3°. Die Veränderung der Winkel läßt die Form der Kurven nahezu unverändert und drückt sich lediglich im Maßstab von W^+ aus. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Protons bei flachen Winkeln geringer.

Abb. 51 stellt die Änderung von W^+ mit dem Reflexionswinkel α_r für drei Energien 1,7, 2,5 und 5 keV/n. dar. Auffällig ist die Unterbrechung des Anstieges der Kurven mit dem Winkel bei Reflexionswinkeln über ca. 2,5° mit Abflachung bei $\alpha_r \approx 3°$. Dies wird mit dem Übergang der geordneten Reflexion am Oberflächenpotential zu einer Reflexion durch einzelne Stöße in Verbindung gebracht. Der kritische Winkel liegt nach Kap. 3 bei 2,7°.

2) W^--Verhältnis

Abb. 52 zeigt die Wahrscheinlichkeit für die Emission von H^--Ionen W^- im Energiebereich von 1,7 - 6 keV/n., und bei Reflexionswinkeln α_r von 1,2 u. 3°.
Auch hier ist kein oszillierendes Ladungsverhältnis mit der Energie gemessen worden. Die Kurven zeigen ein mit größerem Winkel ausgeprägteres Maximum bei ca. 4 keV/n, das entspricht einer Geschwindigkeit von 0,4 v_o.
Die Werte der Kurven bewegen sich zwischen 0,025% und 0,25%.

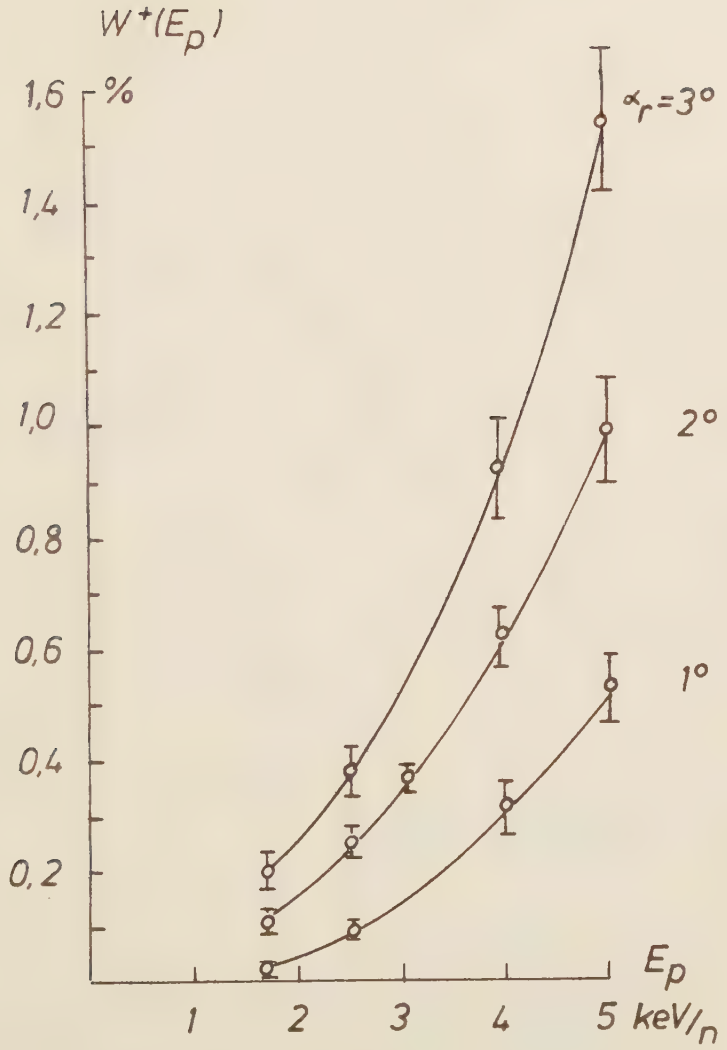


Abb.50 Positiver Ladungszustand $W^+(E_p)$ in Abhängigkeit von der Ionenenergie bei drei Reflexionswinkeln α_r.

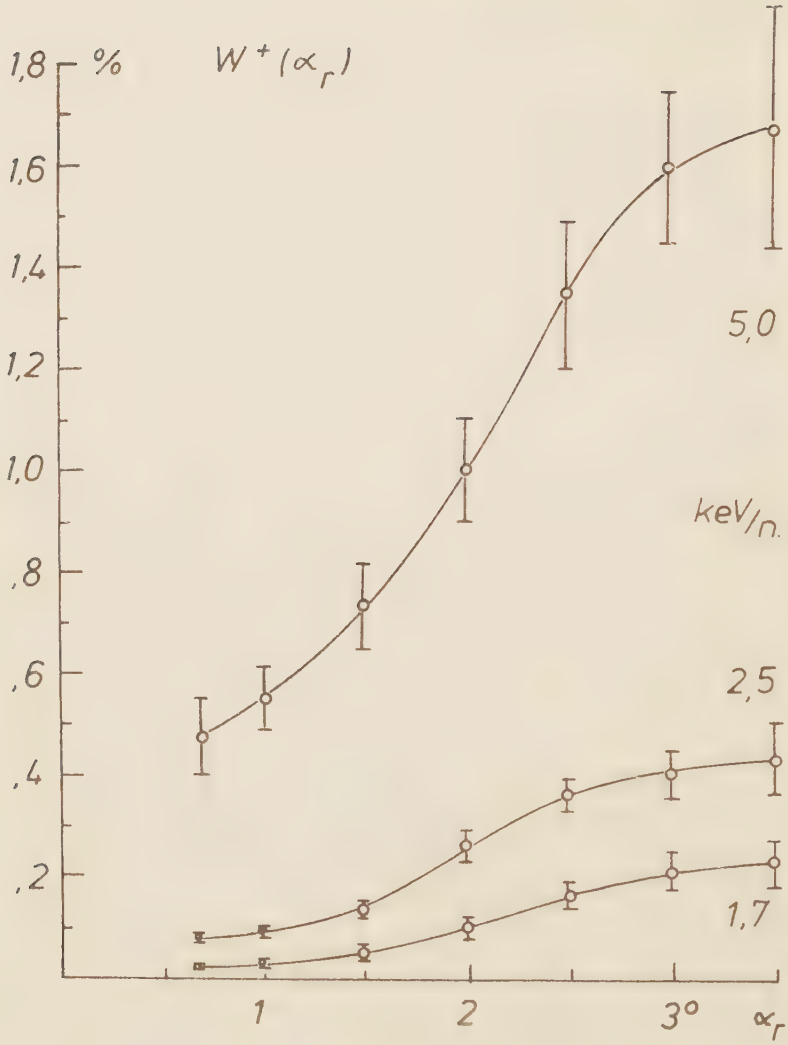


Abb.51 Positiver Ladungszustand $W^+(\alpha_r)$ bei unterschiedlichen Reflexionswinkeln α_r (s.S.101 und Abb.42) für einige Energien E_p.

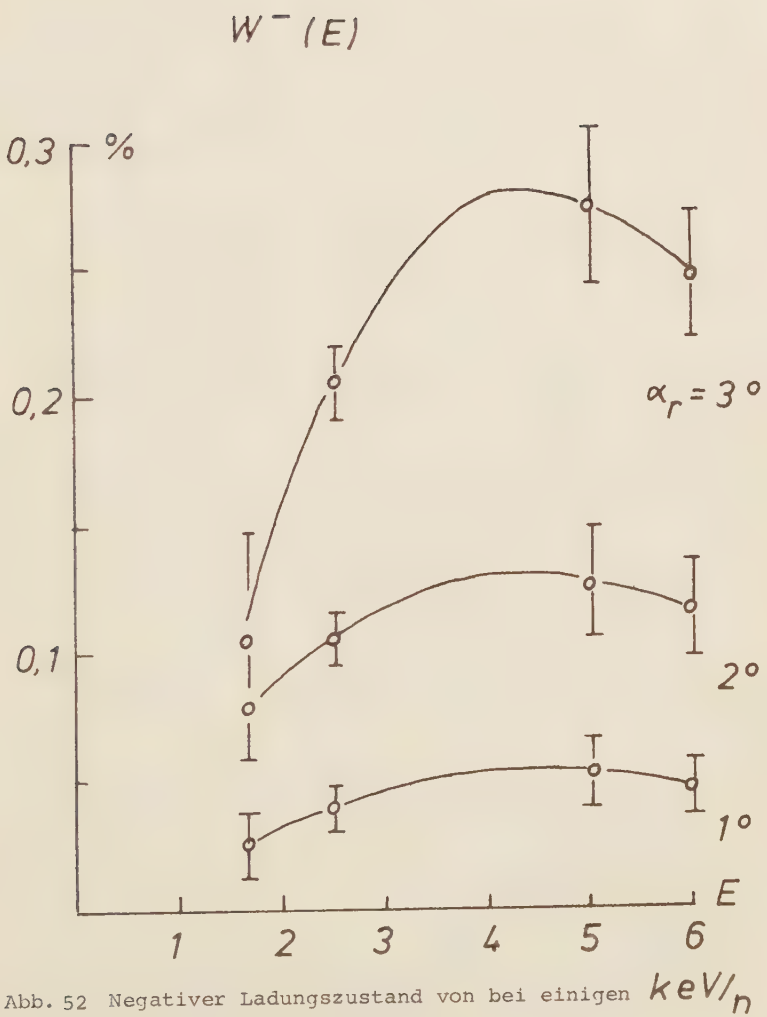


Abb. 52 Negativer Ladungszustand von bei einigen Winkeln α_r reflektierten Wasserstoffionen unterschiedlicher Energien E .

Sie liegen damit um ein bis zwei Größenordnungen unter den W^- Werten,die Verbeek et al.(61) bei Rückstreumessungen an polykristallinen Materialien wie Gold und Nickel bei Emissionswinkeln α von 5° bis 65° (Au) und 45° (Ni) gefunden haben.Die Gründe für die Abweichung können einmal wegen der starken Winkelabhängigkeit von W^- an der Mittelung der Emissionswinkel bei polykristallinem Material(65) liegen. Zum anderen daran,daß die Teilchen bei Rückstreuung durch Gebiete zwischen den Atomen der Oberfläche kommen können, während die nächste Annäherung bei flacher Reflexion s_o in der Größenordnung von a_o liegt(4.31).

Die W^--Werte sind in diesem Experiment gegenüber den W^+-Werten gleicher Geschwindigkeiten von $v_p = 0{,}45\ v_o$ (E_p=5keV) bei Ni eine Größenordnung geringer.
Das W^+/W^- -Verhältnis ist in Abb.53 einmal für die Reflexion von 5 keV Protonen an reinem Ni(110) ,und zum Vergleich an reinem Cu(110) dargestellt.Die Reflexionswinkel waren im Bereich 0,7 bis 3,5°.
Das unterschiedliche W^+/W^--Verhältnis von Ni und Cu resultiert insbesondere bei flachen Reflexionswinkeln aus einer ca.3,5 mal verringerten Bildung von H^--Ionen bei Ni gegenüber Cu bei annähernd gleichen W^+-Anteilen.
Die Nickelprobe war bei den Messungen entmagnetisiert und hatte Raumtemperatur (300K).

Abb.54 zeigt schließlich W^- an Ni(110) für die drei Energien 1,7, 2,5 und 5 keV/n. im Winkelbereich α_r von 0,7° bis 3,5°.

Die Kurven steigen erstaunlicherweise ebenso wie die W^+-Kurven (Abb.51)stark mit dem Winkel α_r an,während sich die Neutralisation verringert.Auch bei W^- ist am kritischen Winkel α_{kr} für die Reflexion ein Abknicken der Kurve zu verzeichnen.

3)Wahrscheinlichkeit für die Emission von H_2^+-Ionen $W(H_2^+)$

In Abb.55 ist $W(H_2^+)$ gegen den Reflexionswinkel α_r von 5 keV H_2^+-Ionen an Ni(110) und Cu(110) aufgetragen.$W(H_2^+)$ ist

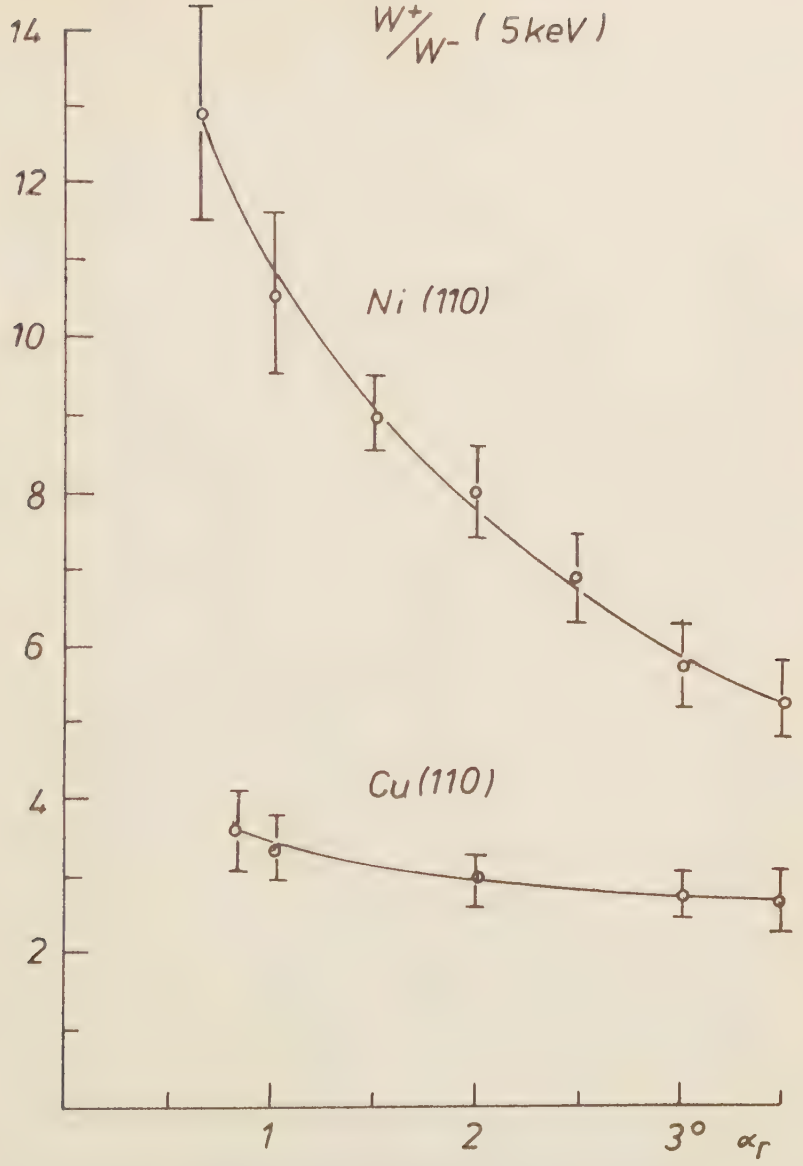


Abb.53 Das Verhältnis von positivem zu negativem Ladungszustand bei Ni(110) und Cu(110) bei Reflexion von 5 keV Protonen unter kleinen Winkeln α_r.

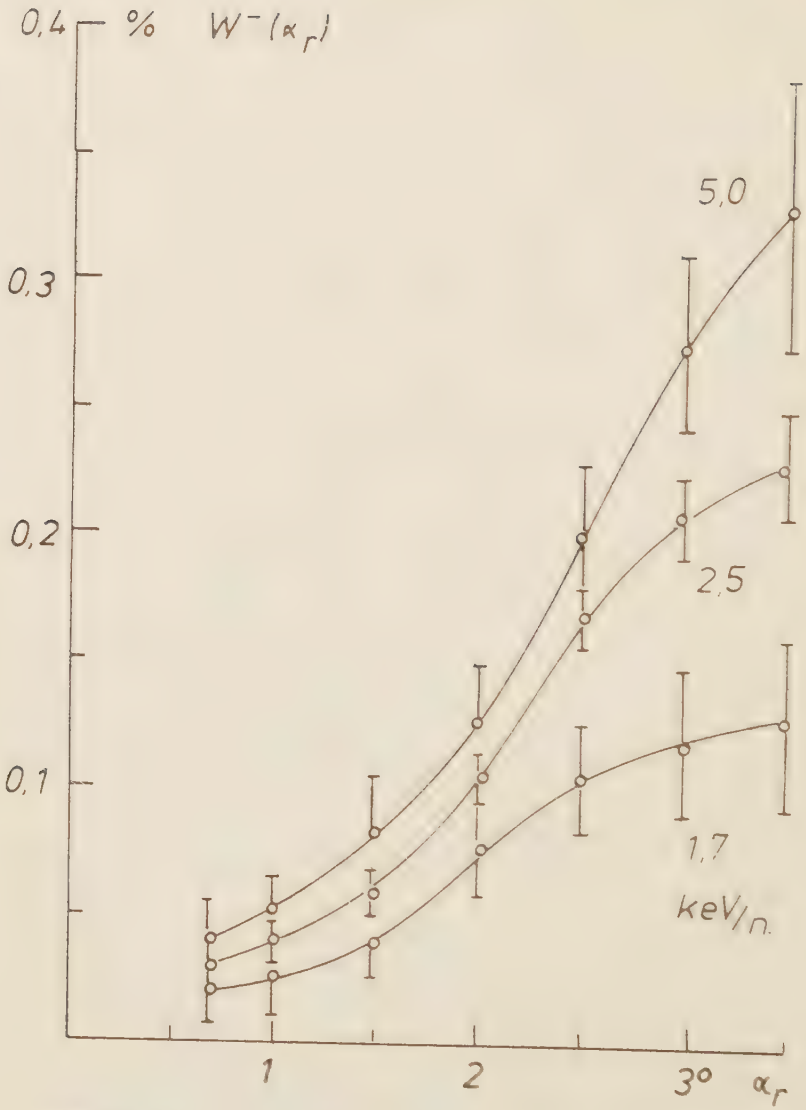


Abb.54 Negativer Ladungszustand von unter verschiedenen Winkeln α_r reflektierten Wasserstoffionen einiger Energien.

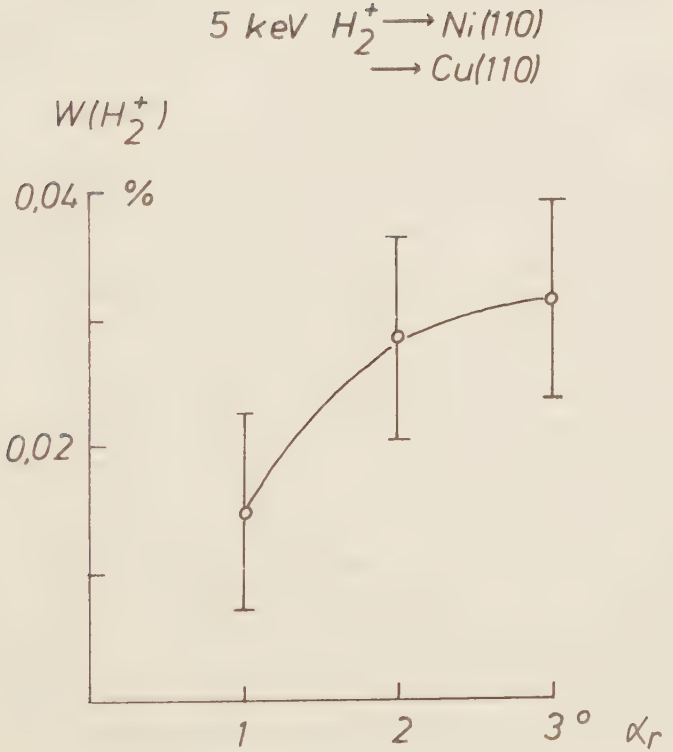


Abb.55 Wahrscheinlichkeit für die Emission von H_2^+-Ionen $W(H_2^+)$ bei Reflexion von H_2^+-Ionen unter kleinen Winkeln α_r, bezogen die emittierten H-Atome.

für die beiden Materialien Ni und Cu etwa gleich und steigt mit dem Reflexionswinkel an.Das sollte man auch erwarten,da der Weg der Teilchen im Elektronenausläufer an der Oberfläche kürzer wird.Die angegebenen Werte beziehen sich allerdings auf den emittierten Nukleonenstrom; sie sind bezogen auf einen H_2 Strom doppelt so groß und besagen,daß im Reflexionsmaximum zwischen 3 und $6 \cdot 10^{-4}$ H_2^+ Ionen je nach Winkel überleben.Die großen Fehlerbalken entstehen durch die sehr kleinen Ströme im pA-Bereich.

4) Einfluß einer Kohlenstoffbedeckung Θ_C:

Abb. 56 zeigt die Veränderung von W+ und W^- bei 5 keV H_2^+ und streifender Reflexion unter 2^o für Bedeckungen zwischen 0,01 und 1,5 Monolagen (ML.) Die Meßergebnisse sind gerade bei diesen flachen Winkeln sehr von der Oberflächenbedeckung abhängig. Dabei ändern sich die Verhältnisse im beobachteten Bereich bei W+ um eine halbe Größenordnung,bei W- etwas weniger,nämlich um etwa das doppelte.
Um Verfälschungen der Meßergebnisse durch Bedeckung auszuschließen,darf die Bedeckung allenfalls in der Grösse einiger hundertstel Monolagen Kohlenstoff,Schwefel Phosphor oder Sauerstoff liegen.

5) Einfluß einer Bedeckung durch Wasserstoff:
Bhattacharya et al.und Verbeek et al. (59), (61), haben verglichen mit C-Bedeckung leichte Unterschiede für W+ und W^- aus Rückstreuexperimenten an Ti und TiH_2 in entgegengesetzter Richtung von bis ca.20% gemessen. Der Effekt durch eine Wasserstoffbedeckung,die in meinem Experiment zwar nicht direkt gemessen werden ,aber wegen der großen H-Abtragung des Strahls als klein abgeschätzt werden kann,sollte daher als klein gegenüber C-bedeckung betrachtet werden können,zumal der Arbeitsdruck der Versuchskammer im unteren 10^{-10} mbar Bereich lag,und die Bedeckungszeit mit ca 30 min für Wasserstoff groß gegenüber der Abtragungszeit von ca.1s war.

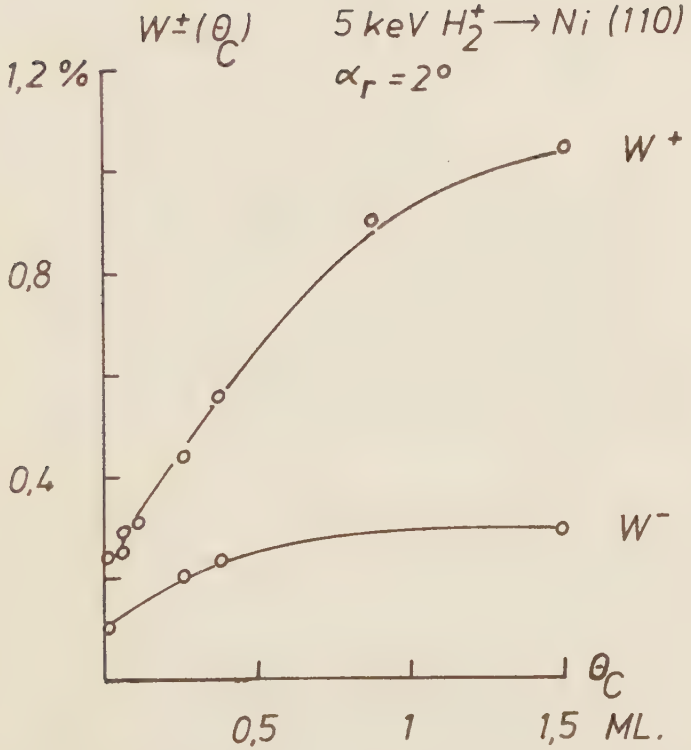


Abb.56 Negativer und positiver Ladungszustand bei unterschiedlichen Bedeckungen der Ni-(110) Oberfläche.

B) Theorien zur Umladung von Ionen durch Festkörper

1) Der Ladungszustand

Die Untersuchung des Ladungszustands von schnellen und langsamen Ionen nach der Wechselwirkung mit Gasen und Festkörpern ist seit der Entwicklung der Atomphysik bis jetzt noch nicht abgeschlossen.

Als entscheidendes Kriterium hat sich außer der Kernladungszahl des Targets und Projektils die Relativgeschwindigkeit herausgestellt. Protonen nehmen bevorzugt Elektronen auf, die im Target die selbe Geschwindigkeit haben, wie das vorbeifliegende Proton. Daher kann man Geschwindigkeitsbereiche unterscheiden, die durch die Geschwindigkeiten der Elektronen des Atoms im Bohrschen Sinne bestimmt sind.

i) Für hohe Protonengeschwindigkeiten $v_p > Z_2 v_o$, der größten Orbitalgeschwindigkeit im Targetatom mit Kernladungszaht Z_2 ist die Neutralisation stark von v_p als auch von Z_2 näherungsweise wie Z_2^3 nach Bohr (43) u. Brandt (62) abhängig.

ii) Für $v_p \approx v_o Z_2^{2/3}$, der mittleren Orbitalgeschwindigkeit im Targetatom nach Thomas-Fermi wird die Abhängigkeit von der Kernladungszahl mit $Z_2^{1/3}$ wesentlich schwächer. Sie verschwindet im Bereich $v_p \simeq v_f$, der Geschwindigkeit der Valenzelektronen.

iii) Für $v_o \ll v_p \lesssim n v_o$ mit $n \approx 3\text{-}5$ kann die Neutralisation in erster Bornscher Näherung beschrieben werden, da die potentielle Energie des Coulombfelds gegenüber $m v_p^2/2$ als Störung betrachtet werden kann.

Oppenheimer (8) und Brinkman u. Kramers (9) berechneten für die Umladung von α-Teilchen in H_2-Gas zu He^+ eine Geschwindigkeitsabhängigkeit wie v^{-12}. ($v \gg v_o$)

Jackson und Schiff konnten bekannte Neutralisationsmessungen von Protonen in Wasserstoff im Bereich $v_o \ll v_p \leq 2{,}5 v_o$ gut wiedergeben. Sie bezogen die Coulombabstoßung der Stoßpartner in ihre Rechnung ein.

in diesem Geschwindigkeitsbereich macht sich der Unterschied von Gasen und metallischen Festkörpern bei der Umladung durch das Vorhandensein von Leitungselektronen im Festkörper bemerkbar.Die Leitungselektronen bewirken eine dynamische Abschirmung des Coulombfeldes des Protons durch Ladungsanhäufung in der Nähe des Protons,was durch Anhebung der potentiellen Energie des Elektrons zu einer Verringerung der Bindung führt,bzw.die Bindung nicht mehr zuläßt (63).Die Neutralisation ist bei Transmission durch Festkörper für $v_o \leq v_p \leq 2v_o$ in der Form $(1+(v_p/v_o)^2)^{-1}$ bei Brandt und Sizmann (19) angegeben.

iv) Im niedrigsten Geschwindigkeitsbereich $v_p < v_f$ können sich die Valenzelektronen auf das Proton einstellen. Die Abschirmung ist nahezu wie im statischen Fall für ein ruhendes Proton.Die Neutralisation erfolgt durch Augerprozesse oder Einelektronenübergänge und wird von mehreren Autoren als $\sim 1-\exp(-\xi/v_\perp)$ mit ξ als einer Konstanten der Dimension einer Geschwindigkeit und $v_\perp$ als Normalengeschwindigkeit.Dies ist eingehend im Abschnitt C dieses Kapitels behandelt.

2) Abschirmung bei kleinen Protonengescheindigkeiten:
Die Abschirmung des Protons kann aus der Reaktion des Elektronengases auf das Feld des Protons abgeleitet werden.Sie wird durch die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(k,\omega)$ beschrieben,die vom reduzierten Wellenvektor $k_p=mv_p/\hbar$ des Protons(m=Elektronenmasse) und der Frequenz $\omega=v_p k_p=mv_p^2/\hbar$ abhängt.
Die Dielektrizitätskonstante kann für $mv_p^2 \ll w_p \hbar$ mit w_p=Plasmafrequenz durch $\varepsilon(k_p,0)$ mit verschwindendem Imaginärteil genähert werden.Für 5 keV Protonen ist mv_p^2=5,4 eV und bei Ni ist w_p=20 eV (79),so daß die Näherung erlaubt ist.Sie führt nach Thomas-Fermi auf

$$\varepsilon(k,0) = 1 + k_s^2/k^2 \qquad (4.3)$$

mit $k_s = \sqrt{3}\, w_p/v_f \cong 1{,}56\, k_o/\sqrt{r_s}$, $k_o = 1/a_o$.

Die im Ortsraum induzierte Abschirmladungsdichte ist für eine positive Punktladung e die aus dem Impulsraum fourierzutransformierende Größe

$$\Delta\varrho(k) = e\,\left(\frac{1}{\varepsilon(k,0)} - 1\right) \qquad (4.4)$$

Mit (4.3) ist

$$\Delta\varrho(\vec{r}) = (-ek_s^2/4\pi r^*)\exp(-k_s r^*) \quad ; \quad r^* = r - v_p t$$

die Abschirmladungsdichte um ein Proton nach Thomas-Fermi. Für Ni (r_s=1,8) ist k_s=1,16 k_o.

Die Singularität im Ursprung tritt bei selbstkonsistenter Näherung (RPA) nicht auf, die Gesamtladung ist in beiden Fällen gleich -e .

3) Abschirmlängen an der Oberfläche

Mit einer Valenzelektronendichte n(s) im Abstand s von der Oberfläche nach (4.20)

$$n(s) = (n_o/2)\exp(-s/a_s)$$

folgt eine Ortsabhängigkeit für den Radiusparameter, der im Festkörper den konstanten Wert r_s hat, nach (102):

$$r_s(s) = (3/4\pi n(s))^{1/3}/a_o$$

$$= 1{,}26\, r_s \exp(s/3a_s) \qquad (4.5a)$$

Bei Ni ist r_s=1,8 und a_s=0,9a_o nach (4.20).

Für die Abschirmlänge folgt nach (2.30a)

$$l_s(s)=1/k_s(s)=0,64\ a_o r_s(s)^{1/2}$$

$$=0,72\ a_o r_s^{1/2}\ \exp(s/6a_s) \qquad (4.5b)$$

Dies ergibt bei Ni:

$$l_s(s)=0,97a_o\ \exp(s/5,4a_o) \qquad (4.5c)$$

4)Bindungsverhältnisse

Die Anhebung der Energieniveaus im H-Atom ist von Rogers et al.(66) in Abhängigkeit von der Abschirmlänge l_s berechnet worden.Sie finden,daß für $l_s > 0,84a_o$ eine Bindungs möglich ist.Dies führt mit (4.5a,b) zur Bedingung,daß der Radiusparameter der Valenzelektronen $r_s(s) > 1,7$ sein muß.

C)Neutralisation bei kleinen Energien ($v_p < v_f$):

1)Augerneutralisation:

Bei der Augerneutralisation sind zwei Leitungselektronen im Metall beteiligt.Eines geht in den Grundzustand des H-Atoms über,und eines wird mit der Differenzenergie abzüglich der eigenen potentiellen Energie emittiert oder wird angeregt.Die Übergangswahrscheinlichkeit ist der örtlichen Elektronendichte und der Wechselwirkungszeit proportional ,und findet in unmittelbarer Oberflächennähe statt.($s \approx 1\text{-}10a_o$)

2) Einelektronenübergang

In den Theorien zur Neutralisation findet die erste Bornsche Näherung auch für $v_p < v_f$ bei einigen Autoren Verwendung(Trubnikov(17),Hagstrum(7),Horiguchi(74)).

Sie ergibt nach Fermis "goldener Regel"eine Übergangsrate von

$$\lambda(s)=2\pi/\hbar \; |V_{if}(s)|^2 \delta(E_i-E_f) \qquad (4.6)$$

mit $V_{if}(s)$ =Übergangsmatrixelement im Abstand s von der Oberfläche, E_i, E_f Energien des Anfangs-und Endzustands. Die Deltafunktion drückt die Energieerhaltung aus.
Einen anderen Weg hat Landau(67)eingeführt.

Landau (67) hat für den Fall eines Überganges eines Elektrons zwischen zwei Zuständen infolge einer adiabatischen Störung eine quasiklassische Näherung in dem Sinne,daß die Wirkung $\int E(t)dt$ wegen der langen Zeitdauer groß gegen $\hbar$ ist,eingeführt.Der Übergang findet zu den Zeitpunkten t_o statt,an denen die Energien der beiden Zustände nahezu gleich sind.Der Zustand des Elektrons wird aus den beiden Eigenfunktionen Ψ_1 und Ψ_2 entwickelt:

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

wobei a_1 und a_2 zeitabhängige Koeffizienten sind.

Da $a_1^2+a_2^2=1$ und für $t=-\infty$ $a_1^2=1$ gibt a_2^2 die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung des zweiten Zustands an.
In der Nähe von t_o ist $a_2^2 \sim t-t_o$.

3)Ladungsrückflußtheorie:

Um das lineare Ansteigen mit der Energie zu erklären,das Matschke et al.(58) bei der Emission positiver Ladungzustände rückgestreuter Protonen gemessen haben,boten Kleber u.Zwiegel(65) eine Theorie an,in der das schnelle Durchstoßen der Oberfläche die im Volumen bereits durch die Abschirmladung quasi-neutralisierten Teilchen wieder

ionisiert.Die nicht-adiabatische Übergangswahrscheinlichkeit liefert für $v_p<v_f$:

$$W^+=0.28(1-|R|^2) \qquad (4.7)$$

mit $R=\langle o|v_p\rangle$
und $|o\rangle$, $|v_p\rangle$ als Wellenfunktionen,die sich aus den induzierten Abschirmladungsdichten ergeben,die die Geschwindigkeiten O (=ruhend) oder v_p(mit dem Proton mitbewegt)haben.Aus (4.4)erhalten sie:

$$\langle o|v_p\rangle = (1/\varepsilon(k_p,k_pv_p)) \quad -1 \qquad (4.7a)$$

und in Thomas-Ferminäherung (4.3):

$$W^+\sim k_p^2/k_s^2 \sim E_p/E_o \qquad (4.7b)$$

mit $k_p=mv_p/\hbar$ und $k_s=\sqrt{3}\,w_p/v_f$; $E_o=me^4/\hbar^2$
für senkrechte Transmission durch die Oberfläche. Schließt der Weg des Teilchens mit der Oberfläche einen Winkel α_r ein,so wird (4.7b)unter Berücksichtigung des Proportionalitätsfaktors:

$$W^+ =(0,25 \quad E_p/E_o)\sin^2\alpha_r \qquad (4.7c)$$

Dies ergibt bei Anwendung auf die in Kapitel 4 mitgeteilten Messungen eine Protonenemissions-Wahrscheinlichkeit bei 5 keV Energie und $\alpha_r = 2^o$ von

$$W^+ = 6\cdot10^{-5}$$

und ist,abgesehen von der nicht richtig wiedergegebenen Energieabhängigkeit(Abb.49)um mehr als zwei Größenordnungen zu klein.Diese Theorie gibt zwar Messungen bei Rückstreuung unter größeren Winkeln richtig wieder,kann aber bei der Interpretation der Messungen bei Reflexion unter flachen Winkeln,möglicherweise durch die Adiabasie des Prozesses,nicht verwendet werden.

4) Oszillatorischer Ladungsaustausch

Haben die Projektil-und Targetatome nahezu gleiche,gebundene Energieniveaus ($\Delta E \approx 5eV$),so zeigt die Neutralisation Oszillationen in der Energie.Die Resonanzbedingung wurde von Tully(69) beobachtet.Diese Oszillationen lassen sich am besten durch die H^+-H Umladung verstehen,wo das Elektron bei nahen Abständen der Kerne zwischen den Protonen oszilliert,und die Wechselwirkungszeit,die durch eine charakteristische Länge und die Geschwindigkeit des Projektils bestimmt ist,eine"Momentaufnahme"der oszillierenden Elektronenzustände erlaubt.

Zartner et al.(68) haben diese Art von Ladungsaustausch bei He an Pb beobachtet,Tully(69) für He an Cd,In,Sn und Pb,die alle wie He bei ca. -24 eV gebundene Energieniveaus haben,berechnet.

Da Ni das dem Valenzband nächste stark lokalisierte 3p-Niveau bei -70 eV,die 3d-Niveaus bei -7eV hat,ist bei H-Ni keine oszillatorische Neutralisation zu erwarten,was auch durch (59) und die hier dargestellten Messungen bestätigt ist.

5) Polarisiertes Licht bei der Neutralisation

Ein Teil der Elektronen wird bei der Neutralisation in angeregte Niveaus eingefangen.Bei zunehmend streifender Reflexion sind Niveaus mit einer bestimmten Orientierung des Drehimpulses bevorzugt,was nach Messungen von Tolk, Heiland et al.(70) beim Zerfall zur Aussendung elliptisch polarisierten Lichtes führt.Sie haben für 3p-2s -Übergänge den Einfangsort des Elektrons aus dem Verhältnis von zirkulär zu linear polarisiertem Licht,hervorgerufen durch Stark-Aufspaltung,als in Abständen von ca.7 a_o von der Oberfläche abgeschätzt.Entsprechende Messungen mit He wurden von Varelas et al.(97) durchgeführt.

D) Abschätzung der Neutralisation:

1) Ratengleichung

Seien

$\sigma_c(x)$ und $\sigma_1(x)$ die örtlichen Einfangs-und Verlust-Wahrscheinlichkeiten

$n_+(x)$ und $n_o(x)$ die Anteile der Protonen und H-Atome

so folgt unter Vernachlässigung des gegenüber $n_o(x)$ sehr kleinen Anteils negativer Ionen und x als Parameter für den Weg der Teilchen die Normierungsbedingung:

$$n_+(x) + n_o(x) = 1 \tag{4.8}$$

und die Ratengleichung für den Anteil der Protonen:

$$dn_+(x)/dx = \sigma_1(x)n_o(x) - \sigma_c(x)n_+(x) \tag{4.9}$$

und mit (4.8):

$$dn_+(x)/dx = \sigma_1(x) - (\sigma_c(x)+\sigma_1(x))n_+(x) \tag{4.10}$$

Die Differentialgleichung hat mit der Randbedingung $n_+(x=x_o)=n_+(x_o)$ die Lösung (89):

$$n_+(x_1)=(n_+(x_o)+\int_{x_o}^{x_1}\sigma_1(x')\exp(\int_{x_o}^{x'}(\sigma_c(x)+\sigma_1(x))dx)dx')\cdot \cdot\exp(-\int_{x_o}^{x_1}(\sigma_c(x)+\sigma_1(x))dx) \tag{4.11}$$

sind σ_1 und σ_c in einem kleinen Bereich $\Delta x=x_1-x_o$ um x_o konstant, so folgt mit den Abkürzungen:

$$p=\sigma_1(x_o) \quad \text{und} \quad q=(\sigma_1(x_o)+\sigma_c(x_o)$$

$$n_+(x_1)=(n_+(x_o)+(p/q)(\exp(q\cdot\Delta x)-1))\exp(-q\,\Delta x)$$

$$=p/q + (n_+(x_o)- p/q)\exp(-q\cdot\Delta x) \tag{4.12}$$

Bei streifender Reflexion unter sehr flachen Winkeln,die in Abb. 3 dargestellt ist,bleibt der Anteil der positiven Ionen im nahezu stationären Fall (bei ~1,7 keV/n.) unter $2 \cdot 10^{-4}$.Damit kann $p \ll q$ angenommen werden,und Gl.(4.12) wird,falls $n_+ \gg 2 \cdot 10^{-4}$ ist,zu:

$$n_+(x_1) = n_+(x_o) \exp(-\sigma_c(x_o) \Delta x) \tag{4.13}$$

genähert werden.Gilt im gesamten Bereich des Weges $\sigma_1(x) \ll \sigma_c(x)$,so ergibt (4.13):

$$n_+(x) = n_+(x_o) \exp(-\int_{x_o}^{x} \sigma_c(x')dx') \tag{4.14}$$

Für einfallende Protonen ist die Anfangsbedingung $n_+(x_o)=1$,damit folgt:

$$n_+(x) = \exp(-\int_{x_o}^{x} \sigma_c(x')dx') \tag{4.15}$$

Führt man eine zeitliche Übergangsrate $\nu(x)$,die vom Ort des Teilchens abhängt,ein,so ist (4.15):

$$n_+(t) = \exp(-\int_{t_o}^{t} \nu(x(t'))dt') \tag{4.16}$$

Mit

$$dx/dt = v_p$$

folgt

$$\sigma_c(x) = (1/v_p)\, \nu(x) \tag{4.17}$$

2)Die Übergangsrate

Die Übergangsrate $\nu(x)$ wurde von einigen Autoren, die nachstehend aufgeführt sind,berechnet.Dabei wurden unterschiedliche Näherungsverfahren verwendet.Einerseits Tunnelrekombination (TR) in quasiklassischer wie auch erster Bornscher Näherung von Trubnikov el al.(17).Andererseits Augerneutralisation (AN)in erster Bornscher Näherung von Hagstrum (7)und mit Einbeziehung der Abschirmung von Horiguchi et al.(74).Schließlich als adiabatischer Übergang unter Verwendung der Landau-Zener-Theorie (LZ) von Kitagawa et al.(18).Danach hängt die Ubergangsrate nur vom senkrechten Abstand zur Oberfläche s ab,und hat die Form:

$$\nu(s) = A \exp(-s/a_s) \qquad (4.18)$$

mit einer Übergangsfrequenz A und einem Exponentialterm $\exp(-s/a_s)$; $a_s \approx a_o$,der in etwa dem Verlauf der Elektronendichte an der Oberfläche für $s \gg 0$ proportional ist.Dieser Term ist von Horiguchi(74) in der Form(4.35) etwas abweichend von (4.17) angegeben worden.Die Übergangsfrequenzen A sind bei den einzelnen Autoren in atomaren Einheiten $E_o/\hbar$:

Hagstrum	(AN)	A = 0,25 a.u.	(4.18a)
Horiguchi	(AN)	0,04 a.u.	
Trubnikov	(TR klass.)	0,33 a.u.	
	(TR qmech.)	0,68 a.u.	
Kitagawa	(LZ)	1,90 a.u.	

Diese Werte sind stark verschieden,und führen auf W^+ - Verhältnisse,die um Größenordnungen differieren.

Daher wurde der Versuch unternommen,$\nu(s)$ in Anlehnung an die allgemeine Beziehung(4.17)durch die in diesem Experiment gegebenen Bedingungen zu bestimmen.Dabei wurde angenommen,daß $\nu(s)$ der mittleren Elektronenzahl im Abstand s von der Oberfläche,bezogen auf das klassische Volumen V_H des Wasserstoffatoms,proportional ist.Die Übergangsfrequenz ist $\Delta E/\hbar$ mit ΔE als Energiedifferenz zwischen der mittleren

Elektronenenergie im Leitungsband (102): $(3/5)E_f$-W und der Ionisierungsenergie im H-Atom.Dabei ist E_f die Fermienergie und W die Höhe der Potentialstufe(Unterkante des Leitungsbandes).Dies ergibt für Ni mit E_f = 9 eV = 0.33 a.u. und W=13.5 eV = 0.5 a.u. eine Übergangsfrequenz A von 0.2 a.u.

Damit ist:

$$\dot{+}(s) = 0.2\,\omega_{\circ}\, n_{el}(s) \qquad (4.19)$$

mit $\omega_{\circ} = E_o/\hbar = me^4/\hbar^3 \approx 4\cdot 10^{16}/s$ und
$n_{el}(s)$ mittlere Elektronenzahl im Volumen V_H

3)Die Oberflächenladungsdichte:
Kohn und Lang (72)haben Elektronendichten im Modell des"Jellium"an der Oberfläche selbstkonsistent berechnet.Die Elektronendichte läßt sich für r_s=1.8 (Ni) angenähert durch die analytische Funktion(4.20) darstellen (94,95):

$$n(s) = n_o \cdot \begin{cases} (1/2)\exp(-s/a_s) & s \geq 0 \\ 1-(1/2)\exp(s/a_s) & s < 0 \end{cases} \qquad (4.20)$$

mit

$n_o = 3/4\pi r_s^3 a_o^3$ Valenzel.-Dichte im Festkörper
r_s Radiusparameter
$a_s \simeq v_f/\sqrt{3}\, w_p = 0{,}64 a_o r_s^{1/2}$ Relaxationslänge
Der Wert des Radiusparameters r_s ist den Tabellen von Isaakson(79)entnommen. Er stammt aus Messungen der Plasmafrequenz.

Für Ni mit r_s=1.8 folgt für $s \geq 0$, $(a_s = 0{,}9a_o)$:

$$n(s) = (n_o/2)\,\exp(-s/0{,}9a_o) \qquad (4.20a)$$

In der Umgebung $r \simeq a_o$ des Protons,das sich im Abstand s von der Oberfläche befindet,ist die Ladungsdichte infolge der Ladungsverdichtung durch die Abschirmung gegenüber der ungestörten Ladungsdichte n(s) um einen Faktor g(s)vergrößert.Almbladh et al.(71)haben diese Ladungs-

verdichtung für verschiedene Elektronendichten im Modell "linearer Abschirmung" berechnet.Sie steigt zwischen Werten des Radiusparameters r_s von 1,4 und 6,0 nur um einen Faktor von ca.3 an,während sich die Elektronendichte um nahezu zwei Größenordnungen verringert.Daher wurde g(s) im Bereich $0 \leq s \leq 4a_s$,der 97% im Integral über die Elektronendichte zur Bestimmung der Übergangsfrequenz beiträgt,als konstant angenommen.Die Ladungsverdichtung beträgt im Mittel für einen Abstand $s=a_s$ bei einem effektiven r_s Wert von 3,0 bei Nickel nach Almbladh (71)5,3.

Damit ist:

$$\overline{g(s)} = 5,3 \qquad (4.21)$$

und die vergrößerte Elektronendichte in der Umgebung des Protons $r \lesssim a_o$ angenähert:

$$n_p(s) = 5,3\ n(s) \qquad (4.22)$$

Die für die Übergangsrate $\nu(s)$ wesentliche Zahl der Elektronen innerhalb des klassischen Volumens des H-Atoms $V_H = 4\pi a_o^3/3$ ist:

$$n_{el}(s) = n_p(s) \cdot V_H \qquad (4.23)$$

Mit (4.20) und (4.22) folgt für $s>0$:

$$n_{el}(s) = (2,65/r_s^3)\ \exp(-s/a_s) \qquad (4.24)$$

und für Ni mit $r_s=1,8$ (79):

$$n_{el}(s) = 0,454 \cdot \exp(-s/a_s) \qquad (4.25)$$

4)Die Bahn der Ionen bzw.Neutralteilchen bei der Reflexion an der Oberfläche:

Die Teilchenbahn kann nach (3.5)als klassisch angenommen werden.Sie verläuft weit außerhalb der Oberfläche $s \gg a_s$ geradlinig,und ist im Ablenkungsbereich der Oberfläche $s \gtrsim a_s$ als hyperbolisch nach Lukas(54)angenommen. Die zur Oberfläche parallele (p(t)) und senkrechte (s(t)) Ortskomponente läßt sich jeweils nach der Zeit t parametrisieren (s.Abb.57):

$$p(t) = (v_p \cos\alpha_r)t \tag{4.26a}$$

$$s(t) = \sqrt{v_\perp^2 t^2 + s_1^2} - s_2 \tag{4.26b}$$

mit
- v_p Protonengeschwindigkeit
- $v_\perp = v_p \sin\alpha_r$ Normalgeschwindigkeit
- α_r Reflexionswinkel(Ein-und Ausfallswinkel)
- s_1 Maximale Abweichung von der asymtotischen Geraden q
- $s_2 = s_1 - s_o$; s_o Umkehrpunkt

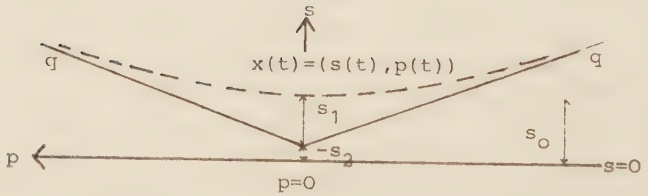


Abb.57 : Die Ionenbahn x(t) - - nahe der Oberfläche s=0,und die asymtotischen Geraden q -

Die Abweichung von den asymtotischen Geraden q ist auf Abstände $s<a_s+s_o$ von der Oberfläche beschränkt.Daher kann $s_1=a_s$ gesetzt werden.Damit wird:

$$s(t)=\sqrt{v_\perp^2 t^2+a_s^2} \; +s_o-a_s \qquad (4.27)$$

5)Abschätzung des W^+-Verhältnisses:

Für einen Weg der Form (4.26a,4.27) und eine Elektronenzahl pro klassischem H-Atomvolumen (4.25) folgt nach (4.19) eine Übergangsrate

$$\upsilon(s)=0{,}091 \exp(-s(t)/a_s)\cdot\omega_o \qquad (4.28),$$

und nach (4.16) ein W^+-Verhältnis

$$W^+=\exp\{-0{,}091\omega_o\int_{-\infty}^{\infty}dt \exp(-s(t)/a_s)\} \qquad (4.29),$$

wenn das Ion die Bahn von $t=-\infty$ bis ∞ durchlaufen hat. Nach Einsetzen von s(t) nach (4.27) und der Substitution $u=v_\perp t/a_s$ folgt:

$$W^+=\exp\{-0{,}495(a_s v_o/a_o v_\perp)e^{-s_o/a_s}\int_0^{\infty}du\, e^{-\sqrt{u^2+1}}\} \qquad (4.30).$$

Dies ergibt mit den atomaren Einheiten a_o und v_o und $a_s=0{,}9a_o$ nach (4.20a):

$$W^+=\exp\{-0{,}30\ (a_s v_o/a_o v_\perp)e^{-s_o/a_s}\} \qquad (4.31).$$

Gl.(4.31) liefert für 5 keV Protonen,die unter einem Winkel von $\alpha_r=2^o$ reflektiert werden ($v_\perp=0{,}016v_o$), das gemessene Resultat für das W^+-Verhältnis an Nickel (110) von 1,0% ,wenn für den Umkehrpunkt $s_o=1{,}2\ a_o$ gesetzt wird.

Das gemessene W^+-Verhältnis kann auch dann aus Gl. (4.30) mit veränderter unterer Integrationsgrenze erhalten werden, wenn der Umkehrpunkt $s_o \lesssim 1{,}2\, a_o$, etwa bei $0{,}5\, a_o$, liegt, und im Bereich $s \lesssim a_s$ eine geringe Verlustwahrscheinlichkeit durch Stöße mit schnellen Leitungselektronen besteht. Das Gleichgewichtsverhältnis ist dann für $s \lesssim a_s$ nach Gl. (4.12) $n_+ = \sigma_1/\sigma_1 + \sigma_c$. Es muß nach der Reflexion an der Oberfläche bei Erreichen des Abstandes $s' = a_s$ etwa 0,1 betragen, wenn die auf dem Rest der Strecke von der Oberfläche weg stattfindende Neutralisation ein W^+-Verhältnis nach (4.32) von 0,01 ergeben soll. Das W^+-Verhältnis ist für einen Weg von der Oberfläche weg mit vorgegebener Anfangsbedingung $n_+(s')$:

$$W^+ \cong n_+(s') \cdot \exp\left(-0{,}091\,\omega_o \int_{s'/v_1}^{\infty} dt\, \exp(-s(t)/a_s)\right) \qquad (4.32)$$

Die Ergebnisse für den positiven Ladungsanteil W^+ nach der Reflexion, die durch die Gln. (4.30-32) erhalten werden, lauten kurzgefasst:

$$W^+ = \exp(-\xi/v_p) \qquad (4.33a)$$

$$W^+ = \exp(-\xi'/v_p \sin\alpha_r) \qquad (4.33b)$$

Die Konstanten ξ, ξ' haben die Dimension einer Geschwindigkeit. Die Form (4.33a) gilt für Reflexion unter einem konstanten Winkel.

6)Abschätzungen aus den Theorien in Kapitel 4 C)

a)Augerneutralisation

Hagstrum(7) gibt in seiner Arbeit über die Auslösung von Augerelektronen die Übergangsrate für die Neutralisation an als:

$$\nu(s) = A \cdot \exp(-(2\sqrt{2m\phi}/\hbar)s) \qquad (4.34)$$

mit $A = 10^{16}/s = 0{,}24$ a.u.

ϕ = Austrittsarbeit.

Für Ni mit ϕ=0,16 a.u. ergibt (4.33)

$$\nu(s) = 0{,}24 \exp(-s/0{,}9\ a_o) \text{ a.u.} \qquad (4.34a)$$

Eingesetzt in (4.16) und einem Weg wie (4.26 a,b) ergibt dies für $s_o \tilde{=} 1{,}2a_o$, $\alpha_r = 2^o$ und $v_p = 0{,}45\ v_o$ einen Wert für W^+ von $5 \cdot 10^{-4}$%, etwa 3 Größenordnungen zu klein.

Um bekannte Messungen von W^+ besser annähern zu können haben Horiguchi et al.(74) die Augerneutralisation unter Einbeziehung von Matrixelementen und der Abschirmung des Protons nach Thomas-Fermi abgeschätzt und finden :

$$\nu'(s) = A''(f(s)+(Bs+C)h(s)+(Ds^2+Es+F)k(s) \qquad (4.35)$$

mit $f(s)=\exp(-2\varkappa s)$; $h(s)=\exp(-s(\varkappa+a_o^{-1}))$; $k(s)=\exp(-2sa_o^{-1})$

und $\varkappa = \sqrt{2m\phi}/\hbar$, und A''—F Materialkonstanten.

$\nu'(s)$ verläuft ab $s \sim 4\ a_o$ wie $\nu(s)$ aus (4.34) ist aber bei s=0 eine Größenordnung kleiner. Die Ausrechnung von W^+ liefert nunmehr mit $\nu'(s)$ einen Wert von 8%, was sich bei den gleichen Bedingungen wie (4.27 f u.4.34) eher mit den Meßergebnissen vergleichen läßt.

b)Einelektronenübergang

Trubnikov u.Yavlinskii(17) haben den Übergang des Elektrons als Tunnelprozess betrachtet und bekommen im statischen Fall aus der Wahrscheinlichkeit, daß ein Elektron

die Potentialbarriere zwischen der Potentialstufe an der Oberfläche und dem Coulombpotential des Protons überwindet, eine Übergangsrate $\upsilon(s)$ als

$$\upsilon(s)=E_f \exp(-2s\sqrt{2m\phi}/\hbar)\ /\hbar \qquad (4.36)$$

angegeben.Dies liefert entsprechend der Entwicklung der Gl.(4.33a) $W^+=\exp(-\xi/v_p)$,was mit den Messungen (Abb.59) verglichen werden kann,wenn $s_o=2,3\ a_o$ gesetzt wird,was ein höchstwahrscheinlich zu großer Abstand für den Umkehrpunkt ist.Mit einem realistischeren Wert von $s_o \tilde{=} a_o$ ergibt (4.36)einen um Größenordnungen zu kleinen Wert.
Mit Anwendung von Störungstheorie finden sie unter Berücksichtigung der Teilchenbewegung ein Matrixelement F,was im Exponenten von W^+ als Faktor hinzutritt.Es ist geschwindigkeitsabhängig und wird für $v_o=0$ maximal.Dies verschlechtert die Übereinstimmung mit dem Experiment,und ist physikalisch nicht recht plausibel,da die Neutralisation am wahrscheinlichsten sein sollte,wenn Elektron und Proton die gleiche Geschwindigkeit haben.Die mittleren Geschwindigkeiten der Elektronen sind jedoch an der Oberfläche in einer Richtung längs der Oberfläche im Modell des freien Elektronengases nach (4.49) $v_{el} \tilde{=} 0,5 v_f$.

Eine detailliertere Theorie ,die den Übergang eines Elektrons an der Oberfläche betrachtet,stammt von Kitagawa et al.(18).Sie geht auf die Methode von Landau(14) zurück, und deren Weiterentwicklung durch Bates(16).Danach ist W^+ für $v_p<v_f$ bei konstantem Reflexionswinkel α_r:

$$W^+=\exp(-\xi_1 \tilde{M}_{o1}(\vec{k}_{el})/v_p) \qquad (4.37)$$

mit einer Konstanten ξ_1 und einer Größe $\tilde{M}_{o1}$,die sich aus einer Mittelung eines Matrixelementes über die $\vec{k}$-Vertei-

lung des Elektronengases ergibt.Das Matrixelement ist:

$$M_{o1} = \langle \Psi_M | V_M | \Psi_M \rangle \langle \Psi_H | V_H | \Psi_M \rangle / E_o^2 \qquad (4.38)$$

Dabei sind Ψ_M und Ψ_H Elektronenwellenfunktionen des Metalls im Potentialtopfmodell und des bewegten H-Atoms, und V_M,V_H die Potentiale des Metalls(Stufenfunktion) bzw.des Protons.

Die Ausrechnung von M_{o1},das analytisch angegeben wurde,ergab für streifende Ionen mit $v_\perp \ll v_p$:

$$M_{o1} = k_z^2 \; b/a^2 \beta^3 a_o^3 \qquad (4.39)$$

mit

$$b = ((d^2+a)/d)((d/\beta)+((\beta^2-k_z^2+2\beta\delta)/a))$$
$$d = \beta + \delta$$
$$a = \beta^2+k_z^2$$
$$\beta = (a_o^{-2}+k_x^2+(k_y - v_p)^2)^{1/2}$$
$$\delta = (k_a^2-k_z^2)^{1/2}$$

wobei k_x,k_yu.k_z Wellenzahlen der Metallelektronen mit z-Richtung senkrecht zur Oberfläche sind,und $k_a^2=2mW/\hbar^2$ mit W als Potentialstufe ist.
Das Matrixelement (4.39) ist in Abb. 58 in relativem Maßstab dargestellt für $v_p=0,45\ v_o$ in y-Richtung(E_p=5keV). Die weitaus größten Beiträge stammen von Elektronen mit $k_x = 0$ und $k_y^2 + k_z^2 = 2m\,E_f/\hbar^2$.Auf den Ordinaten der Abbildung sind Energien in y und z -Richtung,die sich aus den Wellenzahlen ableiten der größeren Anschaulichkeit halber angetragen.Die mit q^2 bezeichnete Linie entspricht einem Elektron,das sich mit dem Proton mitbewegt(2,7 eV El. $\hat{=}$ 5 keV H^+).Auf der gestrichel--ten Linie haben die Elektronen Fermienergie.

Das Matrixelement wird für $k_y=q_y$ und $k_z=k_f-k_y$ maximal,
daraus folgt,daß die Elektronen mit gleicher Geschwindig-

keit wie das Proton und möglichst großem Impuls in senkrechter Richtung zur Oberfläche am meisten zur Neutralisation beitragen.

Dies ist physikalisch sehr einleuchtend,da ein mitlaufendes Elektron am Rand des Kontinuums liegt,und ein möglichst großer Impuls k_z die größte Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit im Ausläufer an der Oberfläche bedeutet.

Die Matrixelemente M_{o1} wurden für die verschiedenen Protonenenergien numerisch berechnet und über die k-Verteilung im Elektronengas gemittelt und ergaben für die Neutralisation,bzw die Emission eines Protons:

$$W^+ = \exp\left(-\xi_1 \quad \bar{M}_{o1} \quad /v_p\right) \tag{4.40}$$

wobei die Konstante ξ_1 den Winkel α_r enthält,und die Dimension einer Geschwindigkeit hat.

Dies ist mit den Messungen in Abb. 5 verglichen und liefert eine Übereinstimmung innerhalb der Genauigkeit der Messung.

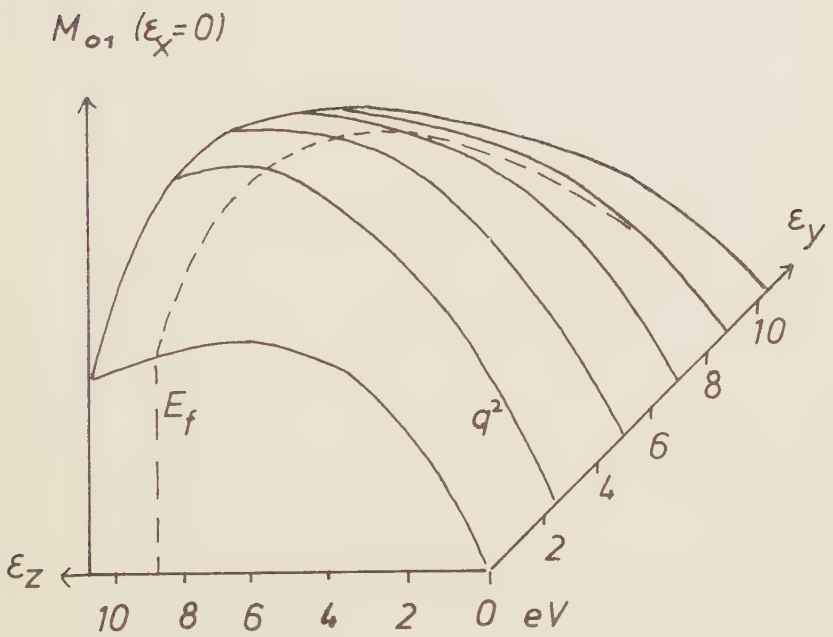


Abb.5 8 Matrixelement für die Neutralisation bei verschiedenen Elektronengeschwindigkeiten an der Oberfläche; z=Normalenrichtung, y=Richtung der Protonengeschwindigkeit; $\varepsilon_z = mv_{el_z}^2/2$; $mv_p^2/2 = q^2$.

E)Umladung zu H^- -Ionen

Vorhandene Theorien und Messungen:

1)Das freie negative Wasserstoffion H^- :

Nach den Berechnungen von Pekeris (75),(76),der die Wellengleichung für Zweielektronensysteme kleiner Ordnungszahl numerisch gelöst hat,besitzt das H^- -Ion einen und nur einen stabilen Zustand bei Abwesenheit äußerer el.magn.Felder.Die Gesamtenergie ist mit 14,37 eV um 0,77 eV geringer als die des H-Atoms.
Der Bindungszustand ist ein Singulett $1s^2\ ^1S$ Zustand mit symmetrischer Ortswellenfunktion der beiden Elektronen, dem Para-Helium entsprechend.
Der mittlere Radius des H- -Ions $\langle r \rangle$ ist 2,7 a_o, der mittlere Abstand der Elektronen $\langle r_{12} \rangle$ ist 4,41 a_o. Es ist in seiner linearen "Ausdehnung" also nahezu doppelt so groß wie das H-Atom (91).
Der $1s2s\,^1S$-und der Triplett $1s2s\,^3P$-Zustand ist nach Pekeris(76) gerade nicht mehr gebunden.
Drake(77) hat den $2p^2\ ^3P$-Zustand als mit 4 meV unter der n=2 Schwelle des H-Atoms gebunden berechnet.Er zerfällt innerhalb von 10^{-7}s über Autoionisationszustände zum H-Atom.Daher kann angenommen werden,daß das H^--Ion nur im Singulettzustand $1s^2\ ^1S$ stabil ist.Die beiden Elektronen müssen antiparallele Spineinstellung haben.
Für sehr starke Magnetfelder $> 10^8$Gauß ist das H^--Ion nach Müller et al.(78) im Triplettzustand $1s2s\,^3P$ stabil. Diese Feldstärken liegen aber weit außerhalb der technischen Möglichkeiten auf der Erde;sie sollen in Pulsaren vorkommen.

2)Das H^--Ion im metallischen Festkörper

Die Energieniveaus des H-Atoms werden durch die Abschirmung im Elektronengas angehoben (66).Das Atom ist bei kleineren Abschirmlängen als $0,83a_o$ (r_s=1,7) nicht mehr stabil.Almbladh et al.[71] haben mit Anwendung nicht-

linearer Abschirmungstheorien errechnet,daß das Proton für r_s-Werte über 1,9 von einer gegenüber linearer Abschirmung stark erhöhten Ladungsverdichtung umgeben ist.Die Umgebungsladung entspricht einem abgeschirmten H^--Ion.Sie nehmen daher für r_s-Werte über 1,9 das H^--Ion als schwach gebunden an,wobei die Bindungsenergie eine im Bereich r_s=1,9 bis 6,0 flach verlaufende Kurve ist, mit einem Minimum von 0,3 eV bei r_s=4 .Sie weisen darauf hin,daß für lineare Abschirmung,die eine schwächere Ladungsverdichtung bzw.Verdrängung bei negativen Ionen bewirkt,ein zweiter r_s-Wert existiert an dem H- instabil wird.(71)

Nickel hat nach Messungen der Plasmonenenergie von 19,5 eV durch Isaakson(79) einen r_s-Wert von 1,8 im Festkörper.Daher ist das H^--Ion im Festkörper wahrscheinlich instabil.Da die Valenzelektronendichte mit wachsendem Abstand s von der Oberfläche nach (4.20) kleiner wird,läßt sich annehmen,daß das H^--Ion in einem bestimmten Abstand s_1 an dem der effektive Wert von $r_s(s)\approx 4\text{-}6$ beträgt,bei kleinen Geschwindigkeiten stabil ist.Aus (4.5a) folgt s_1 zu $1{,}5a_o$ bis $2{,}6\ a_o$.

3)Messungen zur Bildung von H^- -Ionen an Festkörpern:

Über erste Messungen der H^--Ausbeute bei Durchschuß von Protonen durch dünne Folien haben Fogel(80),Phillips (22)1954 ,und etwa 20 Jahre später Berkner et al.(81) berichtet.Sie finden bei ca 5 keV Energie der austretenden Teilchen einen maximalen H^--Ionen Anteil von je nach Material 2-15%,der bei Energien um 75 keV um etwa eine Größenordnung gesunken ist.Da für die Umladung die Oberfläche eine entscheidende Rolle spielt,und der Bedeckungszustand der Oberfläche mit den damaligen technischen Möglichkeiten nur ungenügend kontrolliert werden konnte,können die Messungen nur als ungefähre Aussagen über die H^- -Bildung angesehen werden.

In den letzten Jahren wurden von Verbeek et al.(61) und Bhattacharya et al.(59)Rückstreumessungen unter wesentlich besseren Vakuumbedingungen $4 \cdot 10^{-9}$mbar und mit durch Argon-Kathodenzerstäubung gereinigten Oberflächen durchgeführt.
Sie haben H^--Anteile bei Energien zwischen 0,5 u.8 keV für Rückstreuung an den Materialien Ti,Mo,W,Ni,Au,Si und Si_3N_4,und für Gold unter verschiedenen Emissionswinkeln gemessen.
Die H^--Anteile haben je nach Material bei Emissionswinkeln von 45^o ein flaches Maximum zwischen 2,5 und 4 keV mit Werten von 4-10%.Bei polykristallinem Nickel wurde 7%,bei Gold 6% gefunden.Die Unterschiede werden mit der unterschiedlichen Austrittsarbeit der Materialien in Verbindung gebracht.
Die Abhängigkeit vom Emissionswinkel wurde bei Gold in der Weise angegeben,daß der H^--Anteil zwischen $\alpha_r = 65^o$ und 5^o mit fallendem Winkel um die Hälfte sinkt.Das Maximum der H^--Ausbeute verschiebt sich bei flacheren Emissionswinkeln bis zum doppelten der Energie für steile Winkel (von 2,2 bis 4,5 keV).
Die phänomenologische Beziehung (82)

$$W^- = (1-\exp(-a/v_\perp))\exp(-b/v_\perp) \qquad (4.41)$$

mit Konstanten a,b und $v_\perp = v_p \sin\alpha_r$ als Normalengeschwindigkeit ist durch die Messungen nicht bestätigt worden. Die Messungen ergeben zwar eine Abhängigkeit von v_p, nicht aber von $v_\perp$ in der angegebenen Form.Dies kann zum Teil auf die Mittelung der Austrittswinkel bei Rückstreuung an polykristallinem Material zurückzuführen sein.

F) Interpretation der Messungen

1) Positiver Ladungszustand

a) Energieabhängigkeit

Versucht man die Energieabhängigkeit von W^+ durch eine Funktion der Art Gl.(4.31), oder kurzgefasst

$$W^+ = \exp(-(\zeta/v_p)\exp(-s_o/a_s)) \qquad (4.42)$$

mit einer Konstanten ζ der Dimension einer Geschwindigkeit darzustellen (Abb.49), so muß man Annahmen über den Abstand des Umkehrpunktes von der Oberfläche s_o machen.

Bei einer Reflexion von 2° liegen die Querenergien

$$E_\perp = E_p \sin^2\alpha_r \qquad (4.43)$$

für 1,7 bis 6,7 keV Protonen zwischen 2 und 8 eV.

Die Umkehrabstände wären bei einem TFM-Potential nach (3.6) und Abb.46 zwischen 1,7 und 3,3 a_o mit dem grösseren Wert für die kleiner Energie. Damit ergibt (4.42) an der Oberfläche W^+ -Verhältnisse, die bei konstantem Emissionswinkel mit wachsender Energie im Gegensatz zu den Messungen um eine Größenordnung zwischen 1,7 und 6,7 keV abnehmen.

Dies kann anschaulich durch einen verlängerten Weg im Gebiet hoher Elektronenkonzentration bei größerer Energie E_p und damit größerer Querenergie der Teilchen verstanden werden, der die infolge kürzerer Flugzeit verkleinerte Neutralisation kompensiert.

Wenn die Messungen von W^+ durch eine Beziehung der Art (4.42) dargestellt werden sollen, so muß, um leidliche Übereinstimmung zu bekommen s_o für unterschiedliche Querenergien konstant gesetzt werden.

Die näherungsweise Konstanz des Umkehrpunktes s_o läßt sich aus einem Potential an der Oberfläche ableiten, wie es in Abb 46 b) mit Berücksichtigung der Bildkraft der Oberflächenelektronen dargestellt ist. Dieses Potential hat für Querenergien unter 25 eV

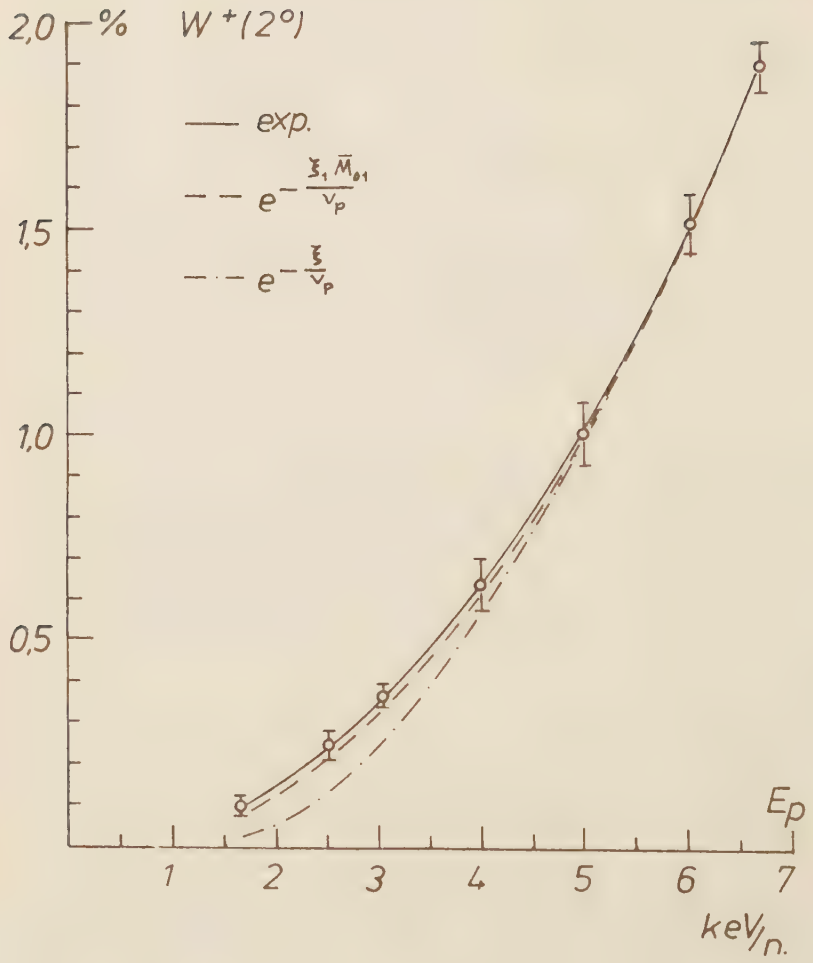


Abb.59 Näherungen des gemessenen positiven Ladungszustands W^+—— durch $\exp(-\xi/v_p)$ nach S.146 - - - und durch $\exp(-\xi_1\bar{M}_{01}/v_p)$ nach S.148 -.-.-.

einen sehr steilen Verlauf,die Umkehrpunkte liegen bei a_o.Das Potentialminimum liegt bei ca. 1,5 a_o, in Analogie zum Gleichgewichtsabstand chemiesorbierten Wasserstoffs an Wolfram (110) nach Smith et al.(96).

Eine gegenüber (4.42) verbesserte Annäherung von W^+ (Abb. 59) gelingt unter Hinzunahme eines geschwindig-
--keitsabhängigen Matrixelementes (4.40) was die Neutralisation bei ca 5 keV gegenüber kleineren Energien leicht begünstigt,da die Korrelation zwischen der Geschwindigkeit von Proton und Oberflächenelektron größer ist.

b) Winkelabhängigkeit

Bei einer Reflexion an einem TFM-Potential (3.6) ergibt (4.31) durch das tiefere Eindringen bei größeren Reflexionswinkeln für wachsende Winkel kleinere W^+-Anteile. Die Messung zeigt das Gegenteil.Sie wird daher auch unter der Annahme eines konstanten Umkehrpunktes s_o diskutiert.

In Abb. 60 sind die Ergebnisse für 5 keV Protonen mit drei Beziehungen verglichen.Die Formel der Art (4.33a) mit $\varkappa = \xi'/v_p$

$$W^+ = \exp(-\varkappa/\sin\alpha_r) \qquad (4.44),$$

ändert sich zwischen 1 und 2^o um 2 Größenordnungen. Sie eignet sich zur Beschreibung der Messung nicht direkt. Bessere Übereinstimmung läßt sich erzielen, wenn man eine Mittelung über den Reflexionswinkel ausführt.Schätzt man die Verkippungen von Oberflächensegmenten aus dem Strahlprofil des reflektierten Stahls (Kapitel 3) ab ,so erhält man bei einer Annahme einer gaußförmigen Verteilung mit einer Varianz von 1^o die in Abb.60 mit Gauß bezeichnete Kurve.Für eine Poissonverteilung P(O) nach (3.2) ergibt die Mittelung die mit Poisson bezeichnete Kurve, die die Messungen etwas besser annähert,als

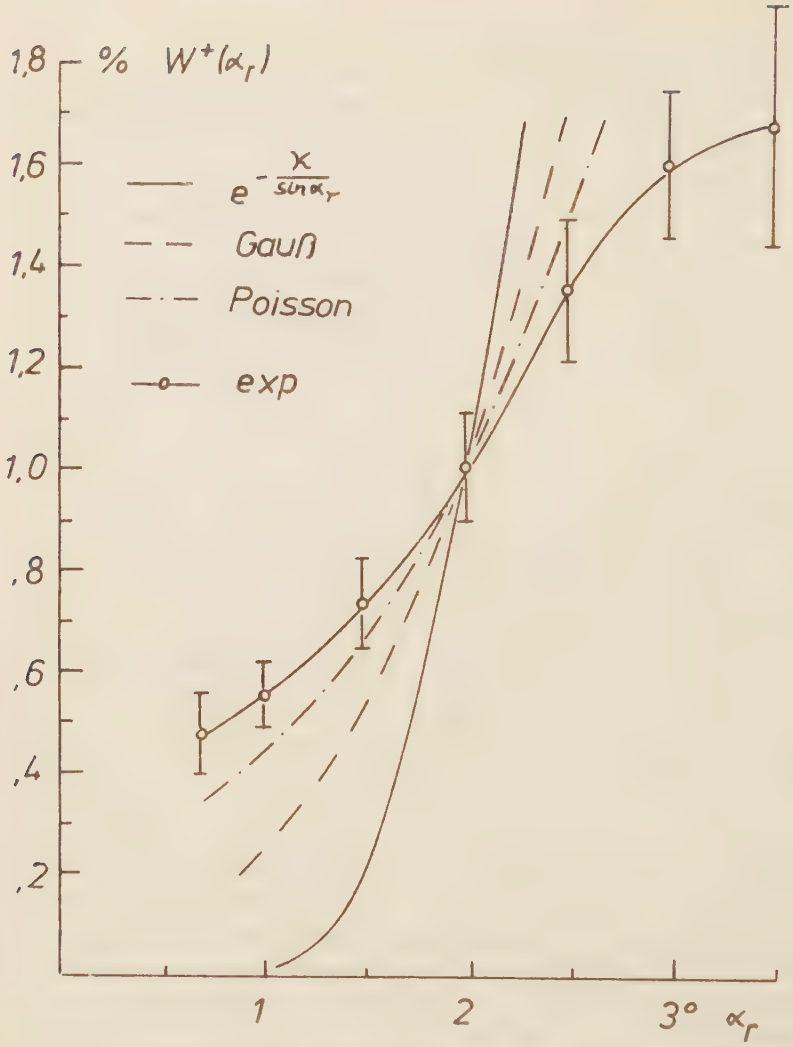


Abb.60 Näherungen des gemessenen reflexionswinkelabhängigen positiven Ladungszustands $W^+(\alpha_r)$ für 5 keV Protonen durch $\exp(-\varkappa/\sin\alpha_r)$ —— (s.S.157) und nach Mittelung der Reflexionswinkel α_r durch eine Gaußverteilung - - - sowie eine Poissonverteilung P(0) -·-·-.

die Mittelung über eine Gaußverteilung.
Die Abweichung der W^+ -Rate bei Winkeln über $2,5^o$ rührt vom Übergang der geordneten Reflexion an den Atomketten der Oberfläche in die Reflexion durch Einzelstöße und die damit verbundene Änderung der Kinematik her.

2)negativer Ladungszustand
Die Wahrscheinlichkeit W^- für die Emission negativer Ionen hat anders als die Neutralisation,die für kleiner werdende Energien stetig wächst ein Maximum bei ca.4 keV und sinkt bei kleineren Energien .

Bei Ni(110) ist der W^--Anteil für streifende Reflexion etwa eine Größenordnung geringer als der W^+-Anteil. Ebenso wie W^+ fällt auch erstaunlicherweise W^- bei flacher werdenden Winkeln,obwohl die Bahnlänge,und damit die Zeitdauer,die für die doppelte Umladung zur Verfügung steht,wächst.

Abb. 52 zeigt,daß die H^--Ausbeute für die drei Emissionswinkel 1,2 und 3^o jeweils ein Maximum bei ca.4keV hat.

Nach Messungen von Verbeek et al.(61) bleibt das Maximum auch für wesentlich steilere Emissionswinkel an etwa der selben Stelle.Daher kommt für die Interpretation eine Beziehung der Art (4.41) nicht in Betracht,da sie ein Maximum bei $E_{max} \sim (\sin^2\alpha_r)^{-1}$ vorhersagt,denn nach (4.41) ist

$$d(W^-)/dv_p) = (1/v_p{}^2 \sin\alpha_r)\exp(-b/v_p \sin\alpha_r)\cdot \cdot (b-(a+b)\cdot(\exp(-a/v_p \sin\alpha_r))) \qquad (4.45)$$

mit Maximum : $dW^-/dv_p=0$ bei:

$$(v_p \cdot \sin\alpha_r)' = v_\perp' = a/\ln(1+a/b) = \text{konst.} \qquad (4.46)$$

a) Korrelation der Elektronen

Die Bildung der H^--Ionen erfolgt auf dem Weg des Teilchens durch den Ausläufer des Elektronengases an der Oberfläche bevorzugt als Anlagerung des zweiten Elektrons an das H-Atom. Der Einfang eines Elektronenpaares ist nach Messungen von Morgan et al. (83) an Magnesium-und Barium-Gastargets einige Grössenordnungen kleiner als die $H\text{-}H^-$ -Umladung an Alkalimetallen. Außerdem sind die Teilchen an der Oberfläche weit überwiegend in neutralem Zustand.

α) Geschwindigkeitskorrelation

Wie schon anhand der Auswertung des Matrixelementes für die Neutralisation in Kap. 4D 6b zu sehen ist, ist die Aufnahme eines Elektrons am wahrscheinlichsten, wenn es gleiche Geschwindigkeit wie das Proton hat. Dies zeigen u.a. auch Messungen von Doughty (84) für die Neutralisation von Protonen an Edelgasen, wo die Geschwindigkeiten der Protonen im Maximum der Neutralisation der Geschwindigkeit der Elektronen im Edelgasatom entsprechen.

Daher liegt es nahe, auch für die Aufnahme des zweiten Elektrons eine Geschwindigkeitskorrelation zwischen dem Elektron und dem H-Atom zu fordern.

Die mittleren Geschwindigkeiten der Elektonen an der Festkörperoberfläche lassen sich folgendermaßen abschätzen:

Die Zustandsdichten der kinetischen Energien ε im Elektronengas sind im Festkörper $\sim\sqrt{\varepsilon}$ für $\varepsilon < E_f$, und an der Oberfläche s=0 nach Werner et al. (64) näherungsweise $\sim\varepsilon^{1,5}$. An der Oberfläche wird die mittlere Energie

$$\bar{E} = (5/7)E_f \qquad (4.47),$$

Für die gemittelten Geschwindigkeiten gilt:

$$\bar{v}_x^2+\bar{v}_y^2+\bar{v}_z^2=(2/m)\bar{E} \cong (5/7)v_f^2 \qquad (4.48)$$

mit der z-Richtung senkrecht zur Oberfläche, x-und y-Richtungen auf der Oberfläche. Wird die x-Richtung in

Flugrichtung des streifenden Ions gelegt,so folgt bei Gleichverteilung der Energie auf die Richungen x,y und z für $\bar{v}_x$:

$$\bar{v}_x \tilde{=} 0{,}49\ v_f \qquad (4.49)$$

Aus der Annahme einer Geschwindigkeitskorrelation zwischen dem H-Atom und den Leitungselektronen für den Einfang eines Elektrons zur Bildung von H^--Ionen läßt sich folgern:

- Das Maximum des W^--Verhältnisses liegt bei Protonengeschwindigkeiten $v_p=0{,}49\ v_f$.
- Die Ausdehnung der für den Einfang zum H^--Ion "aktiven" Schicht an der Oberfläche ist kleiner als die Ausdehnung der Elektronendichte an der Oberfläche.Dies führt zu einer Verringerung des W^--Verhältnisses bei flachen Reflexionswinkeln durch Abstreifverluste an der äußeren "inaktiven"Schicht.

Der erste Punkt läßt das Maximum der H^- Bildung bei Protonengeschwindigkeiten von $0{,}40\ v_o$ bei Reflexion an Ni(entsprechende Energie:4,0 keV)erwarten,was durch die Messungen in Kapitel 4 sowie Rückstreumessungen(61) bestätigt ist.Für Cäsium liefert (4.49) mit $r_s \approx 6$ und $v_f=0{,}3v_o$ ein Maximum der H^-Bildung bei 0,5 keV.Dies ist auch in neueren Messungen an Ni Oberflächen,die mit Cs bedampft waren,gefunden worden(95).

Der zweite Punkt folgt aus dem unterschiedlichen Tunnelverhalten von Elektronen verschiedenen Impulses senkrecht zur Oberfläche.Die Elektronendichte ist im Modell des freien Elektrons im Potentialtopf bei einem Abstand s von der Oberfläche (17)

$$n(s,k_z) \sim k_z^2 \exp(-2s(k_a^2-k_z^2)^{1/2}) := k_z^2 \exp(-s/a_s(k_z)) \qquad (4.50)$$

für Elektronen mit einem Impuls k_z in Richtung s und $k_a^2=2mW/\hbar^2$;W=Höhe der Potentialstufe.

Für Fermielektronen mit senkrechtem Impuls zur Oberfläche ist bei Ni mit W=13,5 eV=0,5 a.u.und $k_f=0,82k_o$:

$$a_s(k_f) = 0,9\ a_o \qquad (4.51)$$

Für Elektronen mit gemitteltem Impuls,die die "aktive" Zone für die H^- Bildung bevölkern,ist nach (4.49):

$$\overline{k_z} = 0,49\ k_f \qquad (4.52)$$

und damit

$$a_s(\overline{k_z}) = 0,55\ a_o \qquad (4.53)$$

Daraus folgt,daß die "aktive" Schicht zur Bildung der H^- Ionen nur ca.60% der Ausdehnung des gesamten Elektronendichteausläufers an der Oberfläche hat.

Die Winkelabhängigkeit des W^--Verhältnisses lässt sich über eine Ratengleichung entsprechend zu (4.9), die das Abstreifen in der äußeren Schicht berücksichtigt, in der Form

$$W^- = W(E)\ \exp(-d/\sin\alpha_r) \quad , \qquad (4.54)$$

mit W(E)als energieabhängigem Faktor und d als einer Konstanten,angeben.Diese Beziehung nähert die Ergebnisse der Abb. 54 für Winkel unter 2,5°,entsprechend der Näherung in Abb.60 für das W^+ Verhältnis.

ß)Spinkorrelation der Elektronen

Die beiden eingefangenen Elektronen müssen im stabilen Zustand $1s^2\ ^1S$ (s.Kap.4E1) des H^--Ions antiparallele Spineinstellungen haben.Daher hängt die Bildung der H^--Ionen bei Wechselwirkung von Protonen mit der Oberfläche des Festkörpers vom Angebot entgegengesetzt orientierter

Elektronen ab.Die H^--Bildung ist diesem Angebot näherungsweise proportional,da die örtlichen Wahrscheinlichkeiten für den Einfang (s.S.139) sehr viel kleiner als für den Verlust sind. Bei nicht ferromagnetischen Metallen wie Cu sind die Dichten der Elektronen entgegengesetzter Spinrichtungen gleich,während sie bei ferromagnetischen Metallen differieren können.

Marschall u.Bross(93) haben die Spinbandaufspaltung bei Ni(110)berechnet und finden sehr verschiedene Zustandsdichten für Elektronen der beiden Spineinstellungen an der Fermikante.Dies wurde auch durch Rau und Sizmann(85) mit dem Einfang polarisierter Elektronen an Ni Oberflächen mit streifenden Deuteronen der Energie 150 keV gezeigt.

Nagy(96) hat im "Jellium"-Modell Elektronendichten für Majoritätselektronen(magnetisches Moment parallel zum Bezugsfeld)und Minoritätselektronen an der Oberfläche selbstkonsistent unter Annahme eines spinabhängigen Potentials und einer mittleren Polarisation der Leitungselektronen von 20% bei Ni berechnet.Er findet die in Abb. 61 dargestellten Spindichten.Grob abgeschätzt sind die Bildungswahrscheinlichkeiten von H^--Ionen bei Reflexion unter flachen Winkeln und mit einem Umkehrpunkt von $s_o \sim a_o$ für Ni ca 2,5 mal kleiner als für das nichtferromagnetische Cu,das etwa gleiche Gesamtdichte der Leitungselektronen und gleiche Austrittsarbeit hat.

Die Messungen zeigen an Cu(110) und Ni(110),daß das W^- Verhältnis bei Zimmertemperatur bei Ni gegenüber Cu um zwischen 1,5 und 3,5 bei $\alpha_r = 3{,}5^o$und $0{,}7^o$ verkleinert ist.Diese unterschiedliche H^- Bildung an Ni und Cu wurde bisher bei Rückstreuexperimenten an polykristallinem Material z.b.Ni ,Au,W,Mo,Ti (59) nicht beobachtet.

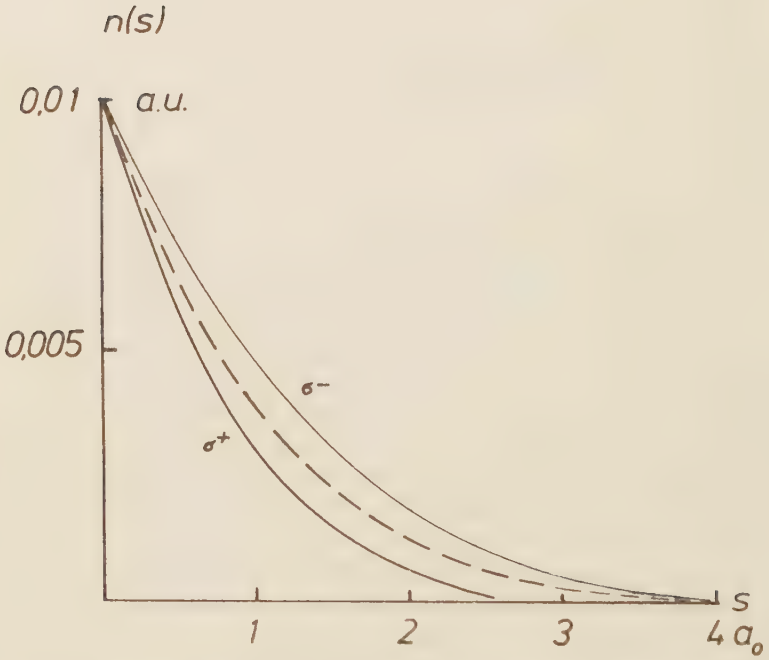


Abb.61 Spindichten n(s) im Abstand s von der Oberfläche von Ni nach Nagy(96)für Majoritätselektronen $\sigma+$ und Minoritätselektronen $\sigma-$.Die gestrichelte Linie entspricht einer gemittelten Dichte $(n_{\sigma+}+n_{\sigma-})/2$.

3)Wahrscheinlichkeit für die Emission eines H_2^+-Ions bei Reflexion von H_2^+-Ionen

Das freie H_2^+-Ion hat einen mittleren Bindungsabstand von 2,44 a_o.Wenn es in den Ausläufer des Elektronengases an der Oberfläche des Festkörpers eindringt, verliert es mit großer Wahrscheinlichkeit sein Bindungselektron.Die beiden Protonen bewegen sich dann durch ihre Abstoßung auseinander,was als Coulombexplosion (86) bezeichnet wird.Dies geschieht bei Abständen,die kleiner als die Abschirmlänge im Elektronengas sind,beschleunigt,und darüber hinaus mit konstanter Geschwindigkeit. Die Wahrscheinlichkeit für die erneute Bildung eines H_2^+-Moleküls hängt beim Verlassen der Oberfläche vom Abstand der beiden Fragmente ab.Sie wird bei Abständen über ca.$5a_o$ klein.

Messungen für den Durchgang schneller H_2^+-Ionen mit v_p=1,7 v_o (87) und v_p=3,7-6v_o (39) ergaben für vergleichbare Wechselwirkungszeiten wie in dem hier aufgeführten Experiment in Abb.55 vergleichbare Überlebenswahrscheinlichkeiten von zwischen $1o^{-3}$ und $1o^{-4}$ für die H_2^+-Ionen. Dabei zeigte sich nur eine geringe Abhängigkeit von der Energie und eine deutliche Abhängigkeit von der Wechselwirkungszeit.

Dahingehend kann auch das Ergebnis der Abb.55 interpretiert werden.$W(H_2^+)$ wird mit flacher werdendem Emissionswinkel der H_2^+-Ionen geringer.Dies erklärt sich durch den längeren Weg des Ions an der Oberfläche und die dadurch vergrößerte Wechselwirkungszeit mit dem Elektronengas der Oberfläche.

ANHANG

Strahlaufweitung durch Raumladung

Die nach außen gerichtete Radialkraft F_r auf eine im Abstand r von der Strahlachse x an der Stelle x_1 befindliche Probeladung e folgt für einen Strahl einfach geladener Ionen der homogenen (s.S.17) Ladungsdichte $\varrho_o = \varrho(t=0)$ bei parallelen Teilstücken Δx um x_1 mit $\Delta x \gg r$ aus dem Gaußschen Satz (101)

$$\oint_{A_r} F_r(r)\,dA = 4\pi k e \int_{V_r} \varrho(r)\,dV = 4\pi k e Q(r_o, \varrho_o) \qquad (A.1)$$

mit A_r und V_r als Oberfläche und Volumen eines Zylinders mit Radius r und Länge $2\Delta x$, sowie $k = 1/4\pi\varepsilon_o$; $\varepsilon_o = 8{,}8 \cdot 10^{-12}$ As/Vm. Die anfänglich eingeschlossene Ladung $Q(r_o, \varrho_o)$ bleibt bei zeitlicher Veränderung von r konstant.
Damit folgt die Radialkraft zu

$$F_r(r) = 2\pi e k \varrho_o r_o^2 / r \quad := m u^2 / r \qquad (A.2)$$

wobei m die Ionenmasse ist, und die Konstante u mit der Dimension einer Geschwindigkeit eingeführt wurde. Sie ist

$$u = (2\pi r_o^2 k j_o e / m v_x)^{1/2} \qquad (A.3)$$

oder

$$u = (r_o^2 j_o e / 2\varepsilon_o m v_x)^{1/2} \qquad (A.4)$$

mit $j_o = \varrho_o v_x$ Stromdichte des Strahls bei t=0

v_x Ionengeschwindigkeit in Strahlrichtung.

Aus (A.2) folgt die Bewegungsgleichung:

$$d^2 r / dt^2 = u^2 / r \qquad (A.5)$$

Die erste Integration mit dr/dt=v liefert:

$$\int_0^{v'} v\,dv = u^2 \cdot \int_{r_o}^{r'} dr/r \qquad (A.6)$$

mit der Lösung:

$$v^2 = 2u^2 \cdot \ln(r/r_o) \qquad (A.7)$$

Die zweite Integration liefert:

$$dr/dt = \sqrt{2}\, u \sqrt{\ln(r/r_o)} \qquad (A.8)$$

und

$$\int_{r_o}^{r} dr/\sqrt{\ln(r/r_o)} = \sqrt{2}\, u \int_o^t dt \qquad (A.9)$$

mit den Substitutionen:

$$R = r/r_o \qquad (A.10)$$

und

$$S = \ln R \qquad (A.10a)$$

folgt

$$dr = dR \cdot r_o = r_o e^S\, dS$$

und

$$\int_o^{\ln R} dS \cdot e^S/\sqrt{S} = \sqrt{2}(u/r_o)t \qquad (A.11)$$

Die linke Seite der Gleichung ist: (A.12)

$$\int_o^{\ln R} dS\, e^S/\sqrt{S} = \int_o^{\ln R} dS \sum_{n=o}^{\infty} S^{n-1/2}/n! = \sum_{n=o}^{\infty} (\ln R)^{n+1/2}/n!\,(n+1/2)$$

Die rechte Seite von (A.12) ist die unvollständige Gammafunktion $i\,\gamma(1/2,-\ln R)$. Sie kann für $R < 5$ durch Mitnahme der Summenglieder bis n=5 mit 1% Genauigkeit genähert werden. Dann ist (A.11) mit $T = (u/r_o)t$:

(A.13)

$$T = \sqrt{S/2}\,(2+2S/3+S^2/5+S^3/21+S^4/108+S^5/660) := F(S)$$

und daraus mit S=lnR

$$R(T)=\exp(F^{-1}(T)) \qquad (A.14)$$

Die Funktion R(T) ist in Abb. 4 angetragen, sie zeigt die zeitliche, und bei konstanter Strahlgeschwindigkeit örtliche Aufweitung des Strahls im Bereich $r<4r_o$. Sie läßt sich für R<2 durch die analytische Funktion $R(T)=1+0.87\ T^2$ mit nur kleinen Abweichungen nähern.

Aus der Näherung

$$R(T)=1+0.87T^2 \qquad (A.15)$$

folgt mit(A.10,13,4) und einer mit der Zeit t durchlaufenen Strecke $x(t)=t/v_x$:

$$r(x)=r_o(1+(x/X)^2) \qquad (A.16)$$

Mit $$X^2= 1{,}15\ mv_x^3/2\pi kj_o e \qquad (A.17)$$

oder

$$X^2= 6{,}50\ \varepsilon_o U^{3/2}/ej_o\sqrt{m} \qquad (A.17a)$$

und X als charakteristische Länge für die doppelte Strahlaufweitung, da $r(X)=2r_o$ ist.

Die Stromdichte verringert sich nach einem Abstand x = l , etwa dem Abstand zweier Blenden auf

$$j(l)=j_o(1+(l/X)^2)^{-2} \qquad (A.18)$$

Dies kann mit (A.17a) als

$$j(l)=j_o(1+j_o/j')^{-2} \qquad (A.19)$$

mit $$j' = 6{,}50\ \varepsilon_o U^{3/2}/el^2\sqrt{m}$$

Abb. 6 2 Zeitliche Aufweitung eines Strahls infolge von Raumladung.

und in gebräuchlichen Einheiten als

$$j' = \left[176(U/kV)^{3/2}/(l/cm)^2\sqrt{m/m_p}\right] A/mm^2 \qquad (A.19a)$$

umgeschrieben werden,wobei U die Strahlenergie in kV, l der Abstand der Blenden in cm,und m die Ionenmasse in Einheiten der Protonenmasse ist.

Die Stromdiche j hat bei $j_o=j'$ ein unphysikalisches Maximum,was von der für große Strahlaufweitungen unzulässigen Näherung (A.15)herrührt,Es wird daher für $j_o > j'$ die Stromdichte nach Durchlauf einer Strecke l als konstant,nämlich als j von $j_o=j'$ angenommen.Damit ist:

$$j(j_o,l) = \begin{cases} j_o/(1+j_o/j')^2 & \text{für } j_o \leq j' \\ j_o/4 & j_o > j' \end{cases} \qquad (A.20)$$

LITERATURVERZEICHNIS

1 Bethe H.A. ,Ann.Phys.5,325(1930)
Bloch F. ,Ann.Phys.16,285(1933)
2 Lindhard J. ,K.Dan.Vid.Skelsk.Mat.Fys.Medd.28,No.8(1954)
3 Ferrell T.L. u. Ritchie R.H. , Phys.Rev.B16,115(1977)
4 Massey H.S.W. ,Proc.Camb.Phil.Soc.26,386(1930)
5 Shekhter S.S. ,J.Exp.Theo.Phys.UDSSR 7,750(1937)
6 Cobas A.u.Lamb W.E.jr. ,Phys.Rev.65,327(1944)
7 Hagstrum H.D. ,Phys Rev.96,336(1954)
8 Oppenheimer J.R. ,Phys Rev.31,349(1928) (1930)
9 Brinkman H.C. u. Kramers H.A. ,Proc.Akad.Sci.Amst.33,973
10 Jackson J.D. u. Schiff H. ,Phys Rev.89,359(1953)
11 Bates D.R. u.Dalgarno A. ,Proc.Phys.Soc.A65,919(1952)
12 Erwe Gewöhnliche Diff.Gleichungen BI-Tb.19
13 Mott N.F. u. Massey H.S.W. ,The Theorie of Atomic Collisions Oxford Univ.Press 1965
14 Landau L.D. ,P.Z.f Sowjet 2,46(1932)
15 Zener C. ,Proc.Roy.Soc.London A137,696(1932)
16 Bates D.R. ,Proc.Roy.Soc.London A247,294(1960)
17 Trubnikov B.A. Yavlinskii Yu.N.,Sov.Phys.JETP 25,1089(1964)
18 Kitagava M. u. Ohtsuki Y.H. ,Phys.Rev.B13,4682(1976)
19 Brandt W. u. Sizmann R. ,Phys.Lett.A37,115(1971)
20 Cross M.C. ,Phys.Rev.B15,602(1977)
21 Rausch v. Traubenberg H. u. Hahn J. ,Z.f.Phys.9,356(1922)
22 Phillips J.A. ,Phys.Rev.97,404(1954)
23 Eckstein W. u.Matschke F.E.P.,Phys.Rev.B8,3231(1976)
24 Rutherford E. ,Phil.Mag.10,193(1905)
Thomson J.J. ,Proc.Camb.Phil.Soc.13,49(1905)
Logeman W.H. ,Proc.Roy.Soc.A78,212(1907)
25 Carter G. u. Colligon J.S. ,Ion Bombardement of Solids , Heinemann Educ.Books London(1968)
26 v.Ardenne M. ,Tab.zur angewandten Physik VEB,Berlin (1962) S.647
27 Popov S.N. ,Sov.Phys.Techn.Phys 6,1047(1962)
28 Gabovich M.D. ,Prib.i.Techn. Eksp.2,5 (1963)
29 Küssner A. ,Z.Naturforsch.21a,515(1966)
30 v.Ardenne M. ,siehe 26,S.618
31 v.Ardenne M. ,siehe 26,S.44
32 Estrup P.J. u.Anderson J. ,J.Chem.Phys.59,1641(1973)
33 Schouten F.C. ,Brake E.TE.,Gijzeman O.C.J.u.Bootsma G.A. , Surf.Sci.74,1(1978)

34 Kaminsky M.,Atomic and Ionic Impact Phenomena on Metal Surfaces Springer V.(1965)S.223

35 Kaminsky M.,siehe 34 , Kapitel 10

36 Alonso E.V.,Baragiola R.A.,Ferron J.,Oliva-Florio A., Rad.Eff.45,119(1979)

37 Ertl G. u. Küppers J.,Low Energy Elektrons and Surface Chemistry. Verl.Chemie(1974)S.7

38 Lucas A.A.,Phys Rev.B20,4990(1979)

39 Gaillard M.J.,Poizat J.C.,Ratikovski A. u. Remillieux J., Nucl.Instr.a.Meth.132,69(1976)

40 Oen O.S. u. Robinson M.T.,Nucl.Instr.a.Meth.132,647(1976)

41 Sternglass E.J.,Phys.Rev.108,1(1957) (1960)

42 Parilis E.S. u. Kishinevski L.M.,Sov.Phys.Sol.Stat.3,885

43 Bohr N.,Mat. Fys. Medd.Dan.Skelsk.18,8(1948)

44 Baragiola R.A.,Alonso E,V.,Ferron J.u.Oliva-Florio A., Surf.Sci.90,240(1979)

45 Lindhard J.,Scharff M.,Schiøtt E.M.,Mat.Fys.Medd.Dan. Vid,Skelsk.33,No.14(1964)

46 Kishinevsky L.M.,Rad.Eff.19,23(1973)

47 Baragiola R.A.,Alonso E.V.,Anciello O.,Ferron J., Lantschner G.u.Oliva-Florio A,Phys.Lett.67 A,211(1978)

48 v.Roos C.,Z.Phys.147,210(1957)

49 Wehner G.,Z.f.Phys.193,493(1966)

50 Colombie N. u. Benazeth C.,Mitschler J.u.Viel L., Rad.Eff.18,251(1973) (1979)

51 Ohtsuki Y.H.,Koyama K. u.Yamamura Y.,Phys.Rev.B20,5044

52 Lindhard J.,Nielsen V. u.Scharff M.,Mat.Fys.Medd.36,10(1968)

53 Pines D.,Elementary Excitations in Solids,Benj.N.Y.1964

54 Lucas A.A.,Phys.Rev.Lett.18,1350(1979)

55 Brandt W.,Atomic Coll.in Solids N.Y.Plenum Press 1975 S.261

56 Overbury S.H.,Dittner P.F.,Datz S. u.Thoe R.S., Rad.Eff.41,219(1979)

57 Heiland W.,Beitat U. u. Taglauer E.,Phys.Rev.B19,1677(1979)

58 Matschke F.E.P.,Dissertation MPI München 1976

59 Bhattacharya R.S.,Eckstein W.,Verbeek H.,Surf. Sci.93,563(1980)

60 Tolk N.H.,Tully J.C.,Kraus J.S.,Heiland W.,Neff S.H., Phys.Rev.Lett.41,643(1978)

61 Verbeek H.,Eckstein W.,Battacharya R.S.,to be publ.in Surf.Sci.

62 Brandt W.,Gatlinburg Conf.1976
63 Isenberg I,Phys.Rev.79,736(1950)
64 Werner C.,Schulte F.K.u.Bross H.,J.Phys.C8,3817(1975)
65 Zwiegel J.,Dissertation TH München 1979
66 Rogers F.J.,Graboske H.C. u.Harwood D.J.,
Phys.Rev.A1,1577(1970)
67 Landau L. u.Lifschitz E.M,Quantenmech.Akad.Verlag
Berlin 1965 S.193 (1978)
68 Zartner A.,Taglauer E.,Heiland W.,Phys.Rev.Lett.40,1259
Buck T.M.,Brongersma H.H.,Nucl.Instr.a.Meth.132,559(1976)
69 Tully J.C.,Phys .Rev.B16,4324(1977)
70 Tolk N.H.,Tully J.C.,Kraus J.S.,Heiland W. u. Neff S.H.,
Surf.Sci.90,447(1979)
71 Almbladh C.O.,v.Barth U.,Popov Z.D. u.Stott M.J.,
unveröffentlicht
72 Lang N.D. u. Kohn W.,Phys.Rev.B1,4555(1970)
73 Sommerfeld A.,Wellenmechan.Ergänzungsbd.Vieweg V. S.30
74 Horiguchi S.,Koyama K. u.Ohtsuki Y.H.,
phys.stat.sol.b87,757(1978)
75 Pekeris C.C.,Phys.Rev.112,1649(1958)
76 Pekeris C.C.,Phys.Rev.126,1470(1962)
77 Drake G.W.F.,Phys.Rev.Lett.24,126(1970)
78 Mueller R.D.,Rau A.R.P.,Spruch L.,Phys.Rev.A11,789(1974)
79 Isaakson D.,Int.Report New York Univ.1975
80 Fogel Ja.M.,Safranov B.S. u.Krupnik L.S.,
Sov.Phys.3,546(1955)
81 Berkner K.M.,Bornstein J.,Pyle R.V.,Stearns J.W.,
Phys.Rev.A6,278(1972)
82 Hiskies J.R. XIVth Int.Conf.on Phen.in Ionized Gases.
Grenoble 1979
83 Morgan T.J.,Erikson F.J.,Phys.Rev.A19,1448(1978)
84 Doughty B.M.,Goad M.C. u.Cernosek R.W.,
Phys.Rev. A18,25(1978)
85 Rau C. u.Sizmann R. Atomic Coll.in olids 1
Plenum Press N.Y.1975
86 Brandt W. u. Ritchie R.H.,Nucl.Instr. a.Meth.132,43(1976)
87 Brandt W.,Laubert R. u. Ratkowski A.,
Nucl.Instr.a.Meth.132,57(1976)

88 Odintzov D.D.,Sov.Phys.Sol.State 5,813 (1963)

89 Redhead P.A. u.Hobson J.B.,The Phys.Basis of UHV Chapman 1968

90 Mott N.F.,An Outline of Wave Mechanics §1.3 p.25 Cambridge 1930

91 Bethe H.A. u. Salpeter E.E.,Quantum Mechanics of One and Two Electron Systems Springer 1957 S.155

92 Smith J.R. u. Ying S.C. u.Kohn W.,Phys.Rev.Lett. 30,610 (1973)

93 Marschall E. u.Bross H.,phys.stat.sol.(b)90,241(1978)

94 Brandt W.,Advances in Chemistry Series 158,S.233 (1976)

95 Eckstein W.,Verbeek H. u. Bhattacharya R.S.,Surf. Sci.99,356(1980)

96 Nagy D.,Surf.Sci.90,1o2(1979)

97 Varelas C.u.Sizmann R,Surf.Sci.71,51 (1978)

98 Callaway J.u.Wang C.S.,Phys.Rev.B 9,4897 (1974)

99 Smith J.R.,Phys.Rev.Lett.25,1o23 (1970)

100 Kashetov A.u.Gorbaty N.A,Sov.Phys.70,1673(1969)

1o1 Jackson J.D.,Class.Electrodyn.S.6 Wiley&Sons (1962)

102 Kittel C.,Quantum Theory of Solids S.87 Wiley & Sons (1967)

103 Moak C.D.,Datz S.,Crawford O.H.,Krause H.F.,Dittner P.F.,Gomez del Campo J.Biggerstaff J.A.,Miller P.D., Hvelplund P.u.Knudsen H,Phys.Rev.A 19,977(1978)

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof.Dr.R.Sizmann für die Anregung zu dieser Arbeit.Seine Anteilname und großzügige Förderung trugen wesentlich zum Gelingen der Arbeit bei.

Den Mitgliedern der Instituts,insbesondere den Herren Dr.C.Varelas,Dr.C.Rau,Dr H.D.Carstanjen und S.Eichner danke ich für wertvolle Diskussionen und gute Zusammenarbeit.

Den Herren der Werkstatt danke ich für ihren Einsatz bei der mitunter anstrengenden Erstellung der Apparatur.

LEBENSLAUF

Ich wurde am 24.Januar 1948 als Sohn des Freiherrn Sigmund von Gemmingen,Major a.D., und seiner Ehefrau Gertrud in Stuttgart geboren.

Ich besuchte nach der Volksschule,in die ich 1955 eintrat,von 1959 bis 1967 das Eberhard-Ludwigs-Gymnasium in Stuttgart, wo ich 1967 das Maturum bestand.

Von 1967 bis 1969 leistete ich den Grundwehrdienst ab.

Im Jahre 1969 schrieb ich mich zum Studium der Physik in München an der Ludwig-Maximilians-Universität ein.

Das Vordiplom legte ich 1971 ab,und begann 1973 bei Prof.Dr.R.Röhler am Institut für medizinische Optik eine Diplomarbeit mit dem Thema "Modulationsübertragungsfuntionen streuender Medien".Die Diplomprüfung bestand ich 1975 und wurde im selben Jahr wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut Prof.Dr.R.Sizmann.Seit Ende 1975 arbeite ich an der Durchführung der Dissertation.